

GISAP:

PHYSICS, MATHEMATICS AND CHEMISTRY

International Academy of Science and Higher Education
London, United Kingdom
Global International Scientific Analytical Project

№5 Liberal* | April 2015



Expert board:

Rena Kasumova (Azerbaijan), Nathan Lebrun (France), Yuri Khlopkov (Russia), Brian Hurst (UK)

“Hypothetics: everlasting stories”

Beauty of slopes of Maritime Alps was amazing. The marvelous combination of the ringing heights, crystal shining of snow-covered peaks, emerald vegetation of passes and foothills, patches of light wandering in fancy caves and gorges, and disturbing breath of the Mediterranean merging with the horizon was able to impress even the most pragmatic mind not predisposed to excessive sensitivity...

The man and the woman, holding hands and silently smiling to each other, slowly moved up the twisting mountain track. Their silent manner of communication made it obvious that they got used to be together all the time, and that this circumstance had a special meaning for them.

- You know that I don't really praise the category of "happiness" because of its abstractness and the possibility to be filled with the most various meanings... But sometimes it seems like I have all the grounds to consider myself happy!

- At last the woman interrupted the serene silence. Holding her wide-brimmed hat she approached the edge of a cliff where the rushes of the Mediterranean wind dominated and laughed sonorously.

- And I am happy even to think that our difficult joint life looks quite attractive to you! – Pierre Curie came closer to his spouse and gently embraced her shoulders.

The couple stood over the wide gorge and thoughtfully looked into a distant horizon swaying of the persistent wind pressure for some time again.

- ...And still the salt of radium is capable to emit radiation changing the structure of human tissue... I am still thinking over a problem of determining the nature of this influence depending on the radiation doses... - Maria Skłodowska-Curie turned to her husband and smiled as if guilty.

- Even being on your favourite mountain camping you can't distract from work and concentrate on vacation, - Pierre made a helpless gesture and looked into the eyes of his wife attentively, - couldn't really these years of continuous researches make you feel at least the temporary disgust for science?

- My dear grumbler, it seems to me that the Nobel Prize obliges us to state new tasks and make new discoveries. It is for the first. And secondly, scientific activity along with our daughters, make the fair part of things I love in life. I feel that further researches will significantly expand the horizons of knowledge not only in physics and chemistry, but also in medicine!

- I agree, Maria! But anyway let's get back to the consideration of these matters at least in two weeks! – Pierre knitted his eyebrows discontentedly. – And now I would like you to totally dissolve in the nature and enjoy these delightful landscapes!

- I am "dissolving" and "enjoying"! – Maria winked to her spouse archly. – But I dream of defining pure metallic radium and I intend to call the new science "radiology"!

Thomas Morgan
Head of the IASHE International Projects Department
April 15, 2015



GISAP: Physics, Mathematics and Chemistry №5 Liberal* (April, 2015)

Chief Editor – J.D., Prof., Acad. V.V. Pavlov
Copyright © 2015 IASHE

ISSN 2054-6483
ISSN 2054-6491 (Online)

Design: Yuri Skoblikov, Helena Grigorieva, Alexander Standichenko

Published and printed by the International Academy of Science and Higher Education (IASHE)
1 Kings Avenue, London, N21 3NA, United Kingdom
Phone: +442071939499, e-mail: office@gisap.eu, web: <http://gisap.eu>

! No part of this magazine, including text, illustrations or any other elements may be used or reproduced in any way without the permission of the publisher or/and the author of the appropriate article

Print journal circulation: 1000

“*Liberal – the issue belongs to the initial stage of the journal foundation, based on scientifically reasonable but quite liberal editorial policy of selection of materials. The next stage of the development of the journal (“Professional”) involves strict professional reviewing and admission of purely high-quality original scientific studies of authors from around the world”

CONTENTS

V. Matutis, M. Grigola, V.A. Graiciunas School of Management, Lithuania PERSON AS AN INDEPENDENT PART OF THE GLOBAL INFORMATION SYSTEM. COMMUNICATION, PRACTICAL APPLICATION, ALGORITHM.....	3
M. Alysheva, «MATI» - Russian State Technological University named after K.E. Tsiolkovsky, Russia ON THE DETECTION OF MATTER SELF-ORGANIZATION PATTERNS	11
R.J. Kasumova, G.A. Safarova, Baku State University, Azerbaijan OPTICAL WAVES INTRACAVITY INTERACTION IN DOMAIN STRUCTURES WITH QUADRATIC AND CUBIC NONLINEARITY.....	13
A. Vykhodets, Odessa National University named after I.I Mechnikov, Ukraine PHYSICS OF FLUIDITY OF METAL SMELT.....	16
Y.I. Khlopkov, M.M. Zay Yar, I. Agaeva, A.Y. Khlopkov, Moscow Institute of Physics and Technology, Russia HIGGS BOSON DISCOVERED! WHAT IS NEXT?	18
G. Simonian, Yerevan State University, Armenia THERMODYNAMICS, BARODYNAMICS AND HORODYNAMICS.....	22
E. Khobotova, I. Grayvoronskaya, Kharkiv National Automobile and Highway University, Ukraine SORPTION PURIFICATION OF WATERS USING THE SLAG ADSORBENT.....	25
G. Simonian, Yerevan State University, Armenia QUANTITATIVE CHARACTERISTICS OF THE REACTION ENVIRONMENT.....	31
G. Simonian, Yerevan State University, Armenia CRITERIA OF REACTIVITY OF α,β -UNSATURATED COMPOUNDS	34

CONTENTS

В. Матутис, М. Григола, Школа менеджмента В.А. Graiciunas, Литва ЧЕЛОВЕК КАК САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ ЧАСТЬ ГЛОБАЛЬНОЙ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ ОБЩЕНИЕ, ПРАКТИЧЕСКОЕ ПРИМЕНЕНИЕ, АЛГОРИТМ.....	3
Алыпшева М.П., МАТИ – Российский государственный технологический университет им. К.Э. Циолковского, Россия К ВЫЯВЛЕНИЮ ЗАКОНОВ САМООРГАНИЗАЦИИ МАТЕРИИ.....	11
R.J. Kasumova, G.A. Safarova, Baku State University, Azerbaijan OPTICAL WAVES INTRACAVITY INTERACTION IN DOMAIN STRUCTURES WITH QUADRATIC AND CUBIC NONLINEARITY.....	13
Выходец А.М., Одесский Национальный Университет им. Мечникова, Украина ФИЗИКА ЖИДКОТЕКУЧЕСТИ РАСПЛАВА МЕТАЛЛА.....	16
Хлопков Ю.И., Зея М.М., Агаева И., Хлопков А.Ю., Московский физико-технический институт, Россия ОТКРЫТ БОЗОН ХИГГСА! ЧТО ДАЛЬШЕ?	18
Симонян Г.С., Ереванский государственный университет, Армения ТЕРМОДИНАМИКА, БАРОДИНАМИКА И ХОРОДИНАМИКА	22
Хоботова Э.Б., Грайворонская И.В., Харьковский национальный автомобильно-дорожный университет, Украина СОРБЦИОННАЯ ОЧИСТКА ВОД ШЛАКОВЫМ АДСОРБЕНТОМ	25
Симонян Г.С., Ереванский государственный университет, Армения КОЛИЧЕСТВЕННАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РЕАКЦИОННОЙ СРЕДЫ.....	31
Симонян Г.С., Ереванский государственный университет, Армения КРИТЕРИИ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ a, b -НЕНАСЫЩЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ.....	34

PERSON AS AN INDEPENDENT PART OF THE GLOBAL INFORMATION SYSTEM. COMMUNICATION, PRACTICAL APPLICATION, ALGORITHM

V. Matutis
M. Grigola

V.A. Graiciunas School of Management, Lithuania

In the previous work [6] the author considered natural information systems, defined what is information on the background of natural information systems and determined what information and what information processes build the person. This time, investigating ourselves we suggest to look at the information system of the person slightly more deeply, and to consider information processes occurring there. We also tried to look for ways of practical application of these theoretical reflections.

Keywords: algorithm, information, genes, program, emotions, disability, physiology, nature, person, coding, decoding, transformation, information transfer, reaction, requirement, thinking, hearing, sight, sound, image, death, birth, imagination, panic, modeling of the person.

Conference participants, National championship in scientific analytics,
Open European and Asian research analytics championship

ЧЕЛОВЕК КАК САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ ЧАСТЬ ГЛОБАЛЬНОЙ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ. ОБЩЕНИЕ, ПРАКТИЧЕСКОЕ ПРИМЕНЕНИЕ, АЛГОРИТМ


В. Матутис
М. Григола

Школа менеджмента В.А. Грайциунас, Литва

В предыдущей работе [6] рассматривалось естественные информационные системы, определилось, чем на фоне естественных информационных систем является информация, какая информация и какие информационные процессы составляют человека. На этот раз, исследуя себя, предлагаем взглянуть на информационную систему человека чуть по глубже и рассмотреть информационные процессы там происходящие. А так же попытались поискать способов практического применения данных теоретических размышлений.

Ключевые слова: алгоритм, информация, гены, программа, эмоции, инвалидность, физиология, природа, человек, кодирование, декодирование, трансформация, передача информации, реакция, потребность, мышление, слух, зрение, звук, изображение, смерть, рождение, воображение, паника, моделирование человека.

Участники конференции, Национального первенства по научной аналитике,
Открытого Европейско-Азиатского первенства по научной аналитике

 <http://dx.doi.org/10.18007/gisap:pmc.v0i5.1033>

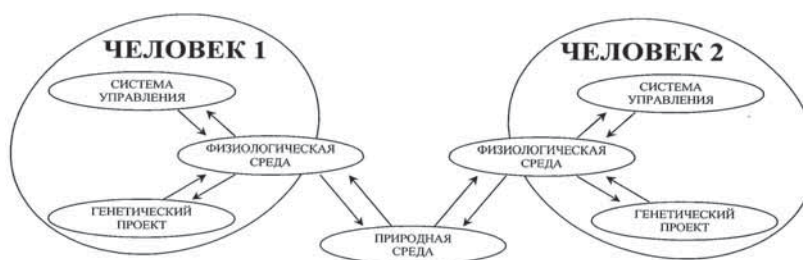
Цель работы

Исследовать процессы передачи информации, происходящие во время коммуникации между людьми на фоне естественных информационных систем. Предложить для обсуждения принцип действия алгоритма, по которому работает программа информационной системы человека. Сформулировать определения, что на фоне естественных информационных систем является мышление, восприятие, воображение, потребности. Очертить возможности практического применения результатов исследования.

Коммуникация

В продолжении всей жизни человека важную роль играет общение между людьми. По этому стоит попытаться понять как две человеческие информационные системы взаимодействуют между собой (Рис.1.) и какие информационные процессы происходят во время общения (Рис.2.).

Очевидно, что один человек с другим может общаться только через природную среду и только при помощи физиологической среды. Непосредственную связь между людьми можно назвать телепатией. Но суще-



**Рис. 1. Как два человеческие информационные системы
взаимодействуют между собою**

ствование такой связи ещё мало исследованно.

Предлагаем рассмотреть что происходит во время общения. В начале в системе управления человека 1 формируется импульсы, которые через нервные провода подходят к соответствующим элементам физиологической среды: в голосовые связки, в язык, в легкие, в мышцы лица и тому подобное. Упомянутые элементы физиологической среды эти сигналы превращают в сигналы природной среды. Сигналы природной среды, достигая соответствующие элементы физиологической среды человека 2 (слуховые органы, глаза), вызывают там реакцию, превращающую сигнал в импульсы нервными проводами передаваемые в систему управления человека 2, где этот сигнал опознаётся. Опознанный сигнал в системе управления чело-

века 2 вызывает реакцию и даёт ответ, который достигает человека 1 таким же образом и такими же путями как и сигнал, ходящий от человека 1 к человеку 2 (Рис.2.).

Рассмотрим следующий пример. У человека 1 появилась потребность что то сказать человеку 2 (Рис.2.). Посмотрим, что в таком случае происходит. Это предлагаем сделать следующими этапами:

1. У человека 1 появляется потребность что то сказать человеку 2. То есть в системе управления человека 1 появляется внутренний импульс, имеющий направление наружу. Но это еще не слова, которыми это всё будет сказано. Например, человек 1 еще не знает какими словами он это скажет.

2. Кодирование. Это первая трансформация информации. Внутрен-



Рис. 2. Информационные процессы во время общения

ние импульсы трансформируются в выходящие импульсы. Упомянутые внутренние импульсы при помощи выученной речевой системой кодирования трансформируются в импульсы, которые нервными проводниками поступают в соответствующие элементы физиологической среды. В данном случае в голосовые связки, в язык, в легкие, в мышцы лица и тому подобное. Набор этих кодированных нервных импульсов передающих конкретную информацию уже можно назвать словом. Но оно ещё не произнесено.

3. Реакция. Вторая трансформация информации. Импульсы трансформируются в движение. Импульсы кодированного слова, воздействуя на соответствующие элементы физиологической среды, принуждают их двигаться. Таким образом происходит движение речевых органов.

4. Сигнал. Третья трансформация информации. Движение речевых органов трансформируется в сигналы природной среды. В данном случае в звук. В общем, движение соответствующих элементов физиологической среды должны трансформироваться в такие сигналы окружающей среды, которые, достигая соответствующие элементы физиологической среды человека 2, их возбудило бы. В данном случае должны быть возбуждены слуховые рецепторы. Когда появляется упомянутый сигнал, можно сказать, что слово уже сказано.

5. Реакция. Четвёртая трансформация информации. Сигналы природной среды трансформируются в движения соответствующих элементов физиологической среды человека 2. В данном

случае звук принуждает вибрировать эндолимфу [4].

6. Импульс. Пятая трансформация информации. Движения трансформируются в импульсы. В человеке 2 колебание эндолимфы принуждает голосовые рецепторы генерировать нервные импульсы по нервным проводникам передаваемые в систему управления человека 2. То есть в центральную нервную систему человека 2.

7. Декодирование. Шестая трансформация информации. Входящие импульсы трансформируются во внутренние импульсы системы управления человека 2. Это означает, что в систему управления входящие импульсы декодируются в соответствии с выученной речевой системой декодирования. Данные импульсы будут опознаны лишь в том случае, если они в системе управления уже имеют свои эквиваленты. Например, если сказанное слово человеку неведомо – то значит, что они друг друга так и не поймут. Хотя все информационные сигналы человека 1 посланные человеку 2, прекрасно дошли до системы управления человека 2. Желая таким образом передавать информацию, нужно, чтобы оба человека знали этот язык. Более того, даже те же самые слова должны иметь такой же самый эквивалент в обеих системах управления. То есть, значение слов оба человека должны понимать одинаково. В противном случае может произойти недоразумения.

8. Декодированные импульсы в системе управления создают реакцию определяющую дальнейшие действия человека 2. Может быть появилось желание что-то сказать в ответ, кивнуть головой или предпринять какие

то другие действия. Если человек 2 решил что-нибудь сказать в ответ, то эта информация должна опять пройти такой же самый долгий путь.

Видим, что передаваемая информация своего носителя меняет даже шесть раз. Каждый раз в момент преобразования информация имеет возможность исказиться. Проблема точности передаваемой информации иногда является одной из основных причин, определяющих отсутствие взаимопонимания между людьми.

Например, недостаточны навыки общения. Импульсы, идущие из системы управления, будут не точно соответствовать тому что человек хочет сказать. Не точно подобраны слова, интонация, тембр голоса, мимика лица, поза и т.п. В следующем этапе информация может быть искажена из за свойств и состояния физиологической среды. Далее на передаваемую информацию влияет шум, видимость, расстояние. Состояние слуховых органов или зрения другого человека тоже играют важную роль. Наконец, опознаваемость информации входящей в систему управления, должна быть приблизительно одинаково у обоих собеседников. Значения произнесённых слов должно пониматься приблизительно одинаково у обоих собеседников. В противном случае люди друг друга не поймут. Или поймут не правильно. Из за чего может возникнуть даже конфликт. Хотя на самом деле никакого разногласия между ними может вовсе и не быть.

Таким путём детализирована схема передачи информации человека к человеку даёт возможность лучше понять и оценить точность и погреш-

ность передаваемой информации. При помощи данной схемы можно детализировать причины неточности и искривления передаваемой информации. Зная упомянутые причины можно формировать эффективную методику их предупреждения или устранения.

Практическое применение

В данной работе человек рассматривается как информационная система. Что важно для практики и какой смысл таких теоретических рассуждений? Попробуем частично ответить на эти вопросы.

При появлении нового подхода, появляются и новые способы решения старых проблем. По-новому взглянув на человека, таких новых способов может появиться множество и в разных областях. Одна из актуальных проблем по сей день являются проблема связанная с физическими недостатками человека, которые некоторым людям создаёт множество неудобств.

Значительные неудобства приносят недостатки, связанные с ограничениями передачи информации с физиологической среды (тело человека) в систему управления человека (информационная система человека) и наоборот. Такими недостатками являются в частности слепота и глухота.

Во-первых, можно подчеркнуть, что при помощи нервных импульсов в систему управления входящая информация является только информацией. Это означает, что в систему управления входящая информация о видимом изображении является только информацией, но не в коем случае не изображением. Аналогично и со звуком. Входящая информация о звуке является информацией, но не звуком. Между прочем, человек опознавать эту информацию об изображении и о звуке должен был научиться в младенчестве, по сколько ни один человек не рождается уже умеющим опознавать и пользоваться этой информацией. Если человеку от рождения имеющему упомянутые недостатки их устраняют – то он, чтобы видеть или слышать, сперва должен тому научиться [1]. Такой человек пока не научится в не состоянии понять не изображения, ни звука. Та-

ким образом, можем констатировать факт, что для людей не существует не изображение, ни звук. Существует только информация об изображении и о звуке.

Возникает вопрос. Какая разница - информация об изображении или изображение, информация о звуке или звук?

В этом понятии о разнице и кроется вся суть ниже рассматриваемых размышлений.

Если мы получаем не изображение а только информацию об изображении – то означает, мы эту информацию можем получать не только с рецепторов глаз, но и с других рецепторов других органов. Нужно только, что эта информация, посылаемая другими рецепторами, была об изображении. Это можно достичь уже существующими технологическими средствами.

Информацию об изображении можно получать различными путями. Эта информация может и не будет такая полная как информация, полученная с рецепторов глаз, но это на много лучше чем быть совсем слепым. Опознавать такую информацию в отдельных случаях нужно будет учиться заново. Но опознавать информацию, идущую с глаз, тоже надо было учиться, хотя мы этого и не помним, поскольку мы этому учились в младенчестве.

Между прочем, является ли слепой человек таким уж совсем слепым? Как это ни странно, но слепой человек тоже по своему видит. Хотя зрение слепого отличается от зрячего.

Например, слепые как и зрячие тоже играют в шашки. Как они видят доску? Оказывается, что доску они видят пальцами не хуже чем зрячие это видит глазами. Очевидное доказательство того, что можно видеть не только глазами. Точно такую же информацию о расположении шашек на доске можно получить не только при помощи глаз, но и при помощи пальцев руки.

Зная о возможности при помощи пальцев получать информацию об изображении, можем подумать как эту возможность использовать. Оценив сегодняшние технические возможности, было бы не очень сложно слепым предложить такой прибор, который

изображение вокруг слепого превращал бы в рельефную поверхность на специальной поверхности упомянутого прибора. Таким образом слепые могли получать информацию что вокруг происходит. При помощи такого прибора слепой смог свободнее двигаться. Мог «видеть» перед собой появляющиеся препятствия, мимо проходящих людей, мимо проезжающие машины и еще много других вещей.

Это только одна из возможностей.

Другая возможность получить информацию об изображении через слуховые органы. Хороший пример уже существующего такого применения - парковочная система автомобилей. Во время парковки автомобиля эта система подаёт слуховой сигнал, информирующий водителя о близости препятствий. Этих препятствий водитель глазами может и не видеть, но он всё равно будет знать об их существовании и даже о расстоянии.

Ещё один пример позволяющий «видеть» ушами - это металлоискатель. Подводная лодка имеет эхолокатор, тоже позволяющий получать информацию при помощи слуха. И т.д.

Значит в поисках возможностей «видеть» не глазами – слух тоже играет не последнюю роль.

В природе существует тоже множество примеров. Летучая мышь в пространстве ориентируется при помощи слуха. Чтобы летать - глаза не обязательны. Змея путь и добычу находит при помощи языка. Некоторые жуки ориентируются при помощи усов. И т.д.

Это еще раз доказывает, что глаза являются не единственным условием, чтобы видеть. Значит, делаем вывод, что используя сегодняшние технологии можно в значительной мере облегчить судьбу незрячих.

С неслышащими людьми ситуация является похожая. Информацию о звуках в систему управления человека можно передавать тоже используя не только слуховые органы. Одним из примеров является перевод на язык жестов. Таким образом неслышащий человек получает возможность «слышать».

Неслышащим людям тоже можно предложить несколько технических решений проблем. Например, если



Рис. 3. Пирамида потребностей

звуковые колебания воздуха превратили бы в колебания чувствительной кожи, в слабые чувствительные электрические импульсы или в световое мерцание – то неслышащий человек информацию о звуке мог бы тоже получать. Нужно только технологическое решение этой идеи.

Здесь можно упомянуть уже существующий пример, как неслышащие дети стараются «слушать» музыку при помощи вибрации звуковых колонок. Они становятся напротив мощной колонки, где от громкоговорителя исходит чувствительные потоки воздуха. Таким образом они получают возможность почувствовать звук. Зная о таких стремлениях неслышащих людей, почему не сделать соответствующий прибор позволяющий получать такие ощущения?

Простейший прибор, например, мог быть вибрирующий браслет или что-то похожее. При помощи такого прибора может быть достаточно трудно было различать слова, но достаточно ясно «услышать» когда кто-то заходит в комнату, когда на улице мимо проезжает автомобиль, когда кто-то позовет по имени. Наконец неслышащий человек смог «услышать» как звучит его имя. Можно было слушать даже музыку, так как при помощи этого прибора можно было прекрасно чувствовать ритм.

Глухонемые не могут произнести связной звук, ибо они не имеют представления, как он звучит. При помощи выше упомянутого прибора даже глухонемые смогли бы попытаться что-то

сказать, узнав, как звучит их голоса.

Упомянутые методы предназначены для людей с физическими недостатками и требуют специального приспособления. Далее, можно предложить и не столь сложные методы предназначенные помочь более широкому кругу людей.

Например, бывают случаи, когда посторонние звуки мешают отдыхать или спать. В таких случаях можно предложить прибор более простой. Предназначение такого прибора является в создании монотонного шума мешающего смысловой информации поступать в систему управления человека. По сколько такая смысловая информация как раз и мешает отдыхать человеческому мозгу.

Конструкция предлагаемого прибора является очень простой. Нужно только, чтобы он создавал монотонный звук, громкость которого, была возможно регулировать по обстоятельствам и по потребности. Еще желательно, чтобы была возможность регулировать и параметры частот издаваемого звука, ибо соответствующие частоты сами по себе вызывают сонливость. Такие частоты бывают разные у разных людей. Поэтому как раз и требуется регулировка. При помощи такого прибора можно будет даже лечить бессоницу. Для этого нужно будет лишь подобрать соответствующие частоты.

Более того, сегодняшняя ситуация в области мобильных телефонов может несколько раз упростить создание таких как выше упомянутые

и похожие приборы. Остаётся найти лишь механическое решение прибора, а электронную – программную часть можно делать при помощи мобильных установив в них специально подготовленную компьютерную программу.

Видно, что теоретические размышления, исследуя человека как естественную информационную систему, может иметь полезное практическое применение. Выше упомянутые предлагаемые варианты лишь малая часть того, чего можно ожидать от этого направления исследований. К выше упомянутым идеям можно прийти и без предлагаемого теоретического исследования, но это было бы случайностью. А при помощи предлагаемой теории это все становится на свои места, создавая **полноценную мозаику человеческой сути**.

Алгоритм информационной системы человека

Детальнее исследуя человека на фоне естественных информационных систем, и стремясь узнать, по каким принципам формируется поведение, движение и действие, возникает потребность к алгоритму информационной системы человека. **Алгоритм** – это последовательная система действий информационных процессов. Имея исходные данные алгоритм позволяет получить желаемый результат. Результатом в нашем случае является действия человека.

Действие человека – это способ непосредственно или косвенно удовлетворять свои потребности.

Ничего не происходит без причин. Это положение относится и к человеку. Если имеется потребность – значит и действия являются возможными. Если потребностей не имеется – значит и действий никаких не будет. (Рис.3.) [1] Альтруизм и самопожертвование тоже являются обусловлены потребностями. Человек обустроен так, что его потребности исчезают только тогда, когда человек умирает. Пока человек живой, он всегда находится под воздействием потребностей. По этому, пока человек живой, он непрерывно находится в действии. Например, человек всё время дышит

-волевое действие. Сердце стучит беспрерывно действие произвольное. И так далее.

Такие действия как мышление, учение, общение и т.п. является подготовительными или промежуточными действиями. При помощи подготовительных действий человек подготавливает себя быть способным удовлетворять свои потребности. Например, человек учится чтобы в будущем получить работу, зарабатывать деньги, которые нужны для удовлетворения потребностей. При помощи промежуточных действий человек создаёт реакцию окружающих или подготавливает среду вокруг себя, которая помогает ему удовлетворять потребности. Например, человек просит преподать поближе хлеба, ибо сам со своего места, сидя за большим столом, не может его достать.

Действия человека координирует система управления, благодаря которой человек функционирует как цельный механизм. Систему управления человека составляют две части - пассивная и активная. Пассивная управляет произвольными процессами организма – биение сердца, сужение зрачка глаз, выделение гормонов и прочие. Активная часть системы управления человека обрабатывает информацию, полученную с снаружи человека и, оценив информацию, полученную с физиологической среды, формирует осмысленные движения, совокупность которых является поведением человека. Этот информационный процесс в человеческом восприятии проявляется в виде ума, сознания, интеллекта; эмоций, чувств и т.д.

Таким образом подошли к моменту, когда уже можно начать рассматривать алгоритм информационной программы активной части системы управления человека. Это означает, что будем выявлять программу, которой природа запрограммировала информационную систему человека. Можно подчеркнуть, что процесс программирования не закончен и по сей день. Он успешно продолжается в виде эволюции. Кто знает, каким станет человек спустя несколько десятков миллионов лет? Но имеем что имеем. Что имеем то и будем рассматривать, угадывание будущего оставляя научной фантастике.

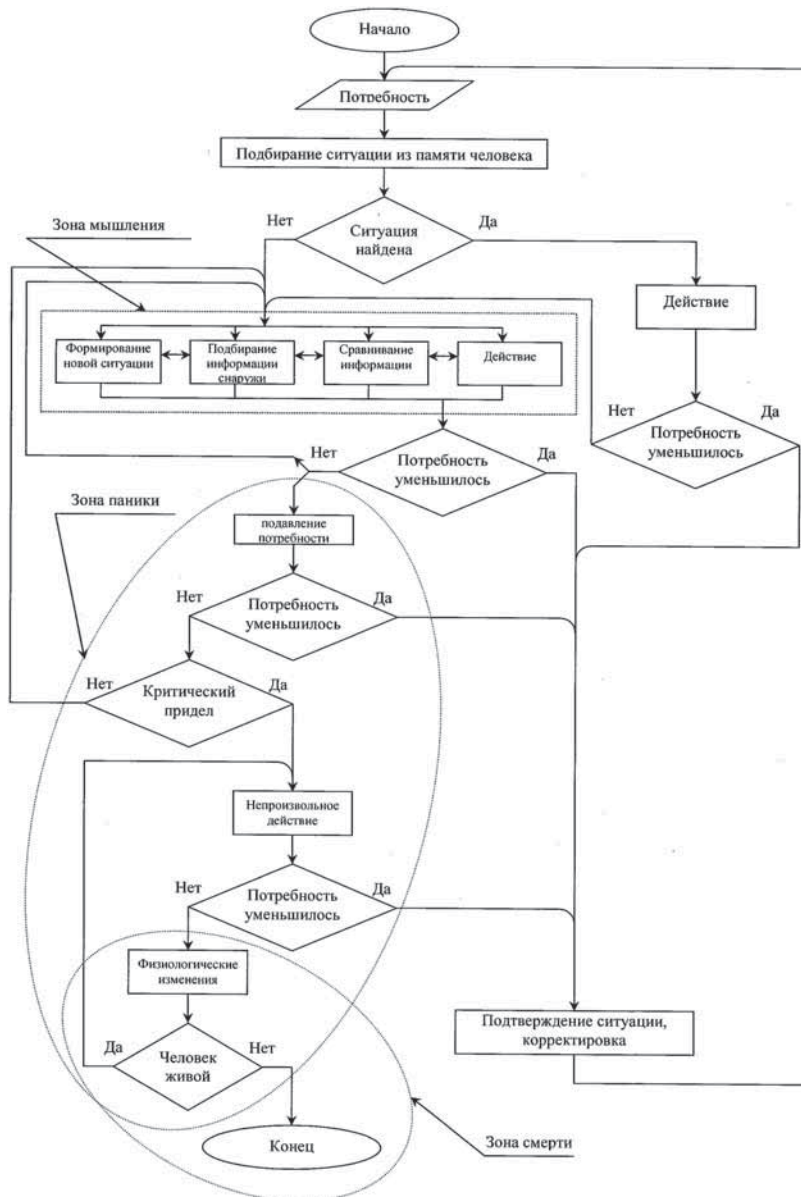


Рис. 4. Алгоритм информационной системы человека

Алгоритм, представляемый на рассмотрение, показывает лишь сам принцип действия. Полностью информационная система человека пока не исследована. Исследование принципа действий открывает возможности в дальнейшем попытаться углубиться в отдельные части системы (Рис.4.).

В данном алгоритме можем выделить его части, которые показывают начало (рождение), введение потребностей, подборка и моделирование ситуаций, действие, зона паники, зона смерти.

Начало – это рождение человека.

Введение потребностей. В этой части алгоритма физиологическая среда человека в программу вводит

задачу, которая в психологии именуема как **потребность**. При рождении человека программа активируется первой потребностью. Первая потребность – это физиологическая потребность воздуха, принуждающая человека начать дышать. В самом начале информации, как удовлетворять эту потребность, нету. Физическому телу нужен кислород. Программа активизирует зону паники, при помощи которой выполняется инстинктивное действие, принуждающее младенца плакать, и таким образом вдохнуть первый глоток кислорода. Вдохнув младенец чувствует облегчение. Это означает, что, начиная дышать, потребность кислороду уменьшается,

так как эта потребность удовлетворяется. Таким образом, в информационную систему человека вписывается первое количество информации, которая будет использоваться при каждом появлении потребности к кислороду.

Подборка и моделирование ситуаций – это место алгоритма, где обрабатывается информация, накопленная человеком. При воздействии этих информационных процессов проявляется такие явления, которые мы понимаем как опыт, воображение, мышление.

Опыт – это набор скопленных ситуаций в памяти человека, предназначенных для удовлетворения разных потребностей. При появлении потребности, система начинает поиск схожей ситуации, при помощи которой в прошлом была удовлетворена данная потребность. Далее, руководствуясь найденной ситуацией, будет выполнены соответствующие действия.

Ситуация – это информация, хранящаяся в механизме хранения информации человека, о действиях, предназначенных для удовлетворения конкретной потребности. Таких ситуаций у человека может храниться множество. Данные ситуации подсказывают человеку, что он должен делать, как должен себя вести при одних или других обстоятельствах, при воздействии одних или других потребностей.

Если человек при воздействии потребности в своей памяти находит нужную ситуацию то, руководствуясь этой информацией, человек предпринимает соответствующие действия. Если эти действия являются причиной удовлетворения и уменьшения данной потребности, то эта ситуация обновляется новыми деталями, и сохраняется до появления той же самой потребности при схожих обстоятельствах в будущем.

Если в памяти ситуацию найти не удастся или, выполнив действия неправильно выбранной ситуации, потребность не удовлетворяется, возвращаемся в исходное положение алгоритма где ситуация еще не найдена. В таком случае начинается моделирование ситуации. Этот процесс человек понимает как мышление. Часть алгоритма, где проявляется данный процесс, будем называть *зоной мышления*.

Мышление – это информацион-

ный процесс, во время которого, решается, в виде потребностей в программу введена задача, о том, какие должны приниматься действия, чтобы удовлетворять появляющиеся потребности.

Уровень мышления составляет параллельно действующие четыре элемента, в которых проявляется:

- формирование новой ситуации при помощи уже имеющейся информацией,
- поиск недостающей информации,
- сопоставление и причисление информации,
- действия руководствуясь новой сформированной ситуацией.

Данные элементы имеют свойства действовать вместе, одновременно друг друга дополняя.

Во время формирования новой ситуации при помощи уже имеющейся информации возникает явление, которое человеком понимается как воображение.

Воображение – проекция намечающихся действий и результатов формируемой новой ситуации в восприятии человека. Данная проекция иногда даёт иллюзорную оценку результатов намечающихся действий. Данная оценка не всегда отражает действительность.

Восприятие – это эффект совокупности информационных процессов человека участвующих в выдвижении целей и определяющих способов их реализаций. Во время данных информационных процессов так же проявляется эффект, который человек понимает как своё сознание.

В части, где проявляется сопоставление и причисление информации, наблюдается человеческая возможность сопоставлять и видеть себя в ситуациях, наблюдаемых со стороны, в которых находятся другие люди.

Рассматривая алгоритм, далее видим, что если выполняя действия руководствуясь новой, при помощи зоны мышления сформированной ситуацией, потребность в процессе удовлетворения уменьшается – то эта новая ситуация вписывается в долгосрочную человеческую память как годная для использования.

Если в уровне мышления ситуацию сформировать не удастся, а

потребность дальше увеличивается, подключается *зона паники*, которая принуждает уровень мышления использовать ресурсы побольше за счет подавления других маловажных потребностей. Зона паники активизируется при появлении потребностей, неудовлетворение которых угрожает существованию человека. Данными потребностями являются физиологические потребности, а иногда и потребности в безопасности...

Действие зоны паники человеком понимается как *чувство угрозы*. Чем быстрее увеличиваются упомянутые неудовлетворенные потребности, тем сильнее становится влияние зоны паники. При крайних обстоятельствах зона паники может задействовать максимум ресурсов, имеющихся в человеке.

Постоянная повышенная активность зоны паники может стать причиной психических расстройств и даже самоубийств.

В случаях, когда зона паники уже не помогает, а физиологические потребности достигают критического уровня, начинает активизироваться *зона смерти*. В зоне смерти находится конец алгоритма, воспринимаемый как физическая смерть человека. Под воздействием зоны смерти человек может начать действовать безрассудно, инстинктивно, у него могут появиться судороги и прочее.

Человек в зоне смерти может находиться только ограниченное время. Если ситуация не изменяется, если человеку ничто и никто не помогает, в конце концов физиологическая среда человека перестаёт функционировать и наступает смерть. Например, если человек задохнулся, значит, ему не удалось удовлетворить физиологическую потребность к кислороду. Так же не удовлетворяется соответствующие потребности, когда человек умирает от жажды или от голода, замерзает, умирает от истощения или от разных болезней и прочее.

В таком случае если потребность, при воздействии которой, была задействована зона паники, больше не повышается, начинается подавление данной потребности. Таким образом, потерпев неудачу удовлетворить данную потребность и при отсутствии

угрозы живучести человека, проявляется состояние, в котором человек решает отложить удовлетворение данной потребности до тех пор, пока не изменятся обстоятельства, или пока не появится новая информация, при помощи которой можно будет обновить удовлетворение подавленной потребности.

Потребность, получившая статус подавленной, увеличивает психологическое напряжение, которая отбирает часть используемой энергии, замедляет работу уровня мышления и создаёт чувство дискомфорта.

Человек не в состоянии контролировать появление зон паники и смерти. Появление потребностей вызывающих действие упомянутых зон не зависит ни от взглядов человека, ни от мышления, ни от желаний, ни от каких либо знаний. Появление зон паники и смерти зависит только от особенностей и состояний физиологической среды человека, в том числе множество которых проявляются в виде инстинктов.

Человеку, живущему в социальной среде, нет возможности избежать подавления некоторых инстинктов. Но при этом нельзя забывать, что они несмотря ни на что всё равно существуют, и человек принуждён всё время балансировать между тем, чего хочется и тем что можно.

Учитывая данные утверждения, можно начать детализировать и классифицировать потребности согласно с тем, какое влияние здоровью имеет их подавление в целях социализации. Таким образом классифицируя потребности, можно лучше следить за подавляемыми потребностями, избегая ущерба здоровью и при этом помогая человеку оставаться полноценным членом общества.

В противном случае, неуправляемое подавление некоторых потребностей может привести к серьёзным последствиям, таким как всякого рода психическим расстройствам, болезням, психологическим отклонениям, алкоголизму, самоубийству и т.п.

Исследуя данный алгоритм, видим, что в информационной системе человека действует закон причины и последствия. Причиной, приводящей

в действие информационную систему человека являются потребности:

- Физиологические потребности становятся причиной оставаться живым не только самому, но и продолжать потомство.

- Потребности безопасности - избегать всякого рода опасностей.

- Потребности принадлежности и любви становится причиной социализации.

- Познавательные потребности становятся причиной прогресса. И т.п.

Как уже упомянули, предлагаемый изначальный вариант алгоритма показывает лишь самый принцип действия информационной системы человека. Это означает, что при желании рассматривать его детальнее нужны тщательные исследования, эксперименты подтверждающие или опровергающие появляющиеся выводы, создание новой теоретической основы, программное моделирование, математическое описание принадлежностей и многое другое. Данный алгоритм является достаточно просторным направлением исследования человека к которому можно подключить чуть ли не все направления науки: психологию, физиологию, медицину, биофизику, физику, информационные технологии, математику, химию и т.д.

В последующих работах намечаем рассматривать технологическое решение информационной системы человека сформировавшейся в природе.

Выводы

Предъявленная схема передачи информации человека к человеку даёт возможность лучше понять и оценить точность и погрешность передаваемой информации. При помощи данной схемы можно детализировать причины неточности и отклонения передаваемой информации. Зная причины неточностей, можно формировать эффективную методику их предупреждения или устранения.

Предложено несколько способов практического применения данных теоретических рассуждений, при помощи которых можно облегчить часть неудобств людям имеющим физические недостатки.

Сформулированы определения, что на фоне естественных информационных систем является опыт, мышление, воображение, восприятие.

Предъявлен алгоритм программы информационной системы человека даёт возможность по глубже взглянуть на информационные процессы, происходящие в человеке. Детализирование информационных процессов человека так же даёт возможность усовершенствовать разработки искусственного интеллекта приближая момент начала моделирования информационных процессов человека при помощи современных информационных технологий.

References:

1. David G. Myers, "Psychology", ISBN-10: 1-4292-6178-1 (Psichologija David G. Myers; Poligrafija ir informatika. – Kaunas., 2000., ISBN 9986-850-29-0)
2. Psychology as the behaviorist views it (1913). Watson, John B., Psychological Review, 20, pp. 158–177 (Psichologija biheivioristo požiūriu., John B. Watson; Vilniaus universiteto Specialiosios psichologijos laboratorija, 2004., ISBN 9986-19-544-6).
3. Jonas Hervej, "Voprosy evolyutsii", Nauchnyi tsentr evolyutsii zemli i cheloveka [„Problems of evolution“ Scientific center of evolution of the Earth and man]. – Kaliningrad., 1998
4. Romualdas Abraitis, "Fiziologija cheloveka" [„Human Physiology“], Zmogaus fiziologija/R. Abraitis, P. Cibas, G. Gronow, A. Gutmanas, M. Illert, H. Hultborn, E. Kėvelaitis, H. Kümmel, A. Mályusz, R. Miliuskas, A. Skurvydas, A. Stasiulis, H. Wiese; Kauno Medicinos Universiteto Leidykla. – Kaunas., 1999. ISBN 9986-451396
5. Dobilas Kirvyalis, "Biofizika" [Biophysics], Dobilas Kirvelis; Vilniaus Universiteto leidykla, 2007., ISBN 978-9955-33-055-4, Access mode: <http://www.biofizika.gf.vu.lt/files/uploaded/biofizikos-vadovelis.pdf>
6. V. Matutis, M. Grigola, Chelovek kak samostoyatel'naya chast' informatsionnoi sistemy" [Man as an independent part of the information system], 2013., Access mode: <http://gisap.eu/node/35503>

Литература:

1. David G. Myers, "Psychology", ISBN-10: 1-4292-6178-1 (Psychologija / David G. Myers; Poligrafija ir informatika, Kaunas, 2000. ISBN 9986-850-29-0)

2. Psychology as the behaviorist views it (1913). Watson, John B., Psychological Review, 20, pp. 158–177 (Psychologija bihevioristo požiūriu / John B. Watson; Vilniaus universiteto Specialiosios psichologijos laboratorija, 2004. ISBN 9986-19-544-6).

3. Ионас Герви, "Вопросы эволюции", Научный центр эволюции

земли и человека, Калининград, 1998

4. Ромуальдас Абрайтис, "Физиология человека" (Zmogaus fiziologija / R. Abraitis, P. Cibas, G. Gronow, A. Gutmanas, M. Ilert, H. Hultborn, E. Kėvelaitis, H. Kūmmel, A. Mályusz, R. Miliuskas, A. Skurvydas, A. Stasiulis, H. Wiese; Kauno Medicinos Universiteto leidykla, Kaunas, 1999. ISBN 9986-451396)

5. Добилас Кирвялис, "Биофизика", Biofizika / Dobilas Kirvelis; Vilniaus Universiteto leidykla, 2007. ISBN 978-9955-33-055-4, [http://www.biofizika.gf.vu.lt/files/uploaded/biofizikos-vadovelis.pdf]

6. Вайдотас Матутис, Мариюс

Григола, "Человек как самостоятельная часть информационной системы", <http://gisap.eu/>, 2013. [http://gisap.eu/node/35503]

Information about authors:

1. Vaidotas Matutis - V.A. Graiciunas School of Management; address: Lithuania, Vilnius city; e-mail: matutisvaidotas@gmail.com

2. Marijus Grigola - V.A. Graiciunas School of Management; address: Lithuania, Vilnius city; e-mail: marijus.grigola@gmail.com



INTERNATIONAL SCIENTIFIC CONGRESS



Multisectoral scientific-analytical forum for professional scientists and practitioners

Main goals of the IASHE scientific Congresses:

- Promotion of development of international scientific communications and cooperation of scientists of different countries;
- Promotion of scientific progress through the discussion comprehension and collateral overcoming of urgent problems of modern science by scientists of different countries;
- Active distribution of the advanced ideas in various fields of science.

FOR ADDITIONAL INFORMATION PLEASE CONTACT US:

www: <http://gisap.eu>

e-mail: congress@gisap.eu

ON THE DETECTION OF MATTER SELF-ORGANIZATION PATTERNS

M. Alysheva, research assistant
«MATI» - Russian State Technological University named after
K.E. Tsiolkovsky, Russia

In the present work the author has shown that since the Big Bang, the formation of the Universe was not chaotic. It followed the laws of monotonous and spasmodic development or the step-and-level self-organization. The basic provision of it is the development under laws of levels reflected in special ordered matrixes. Patterns of formation of structures of the next level systems are based on the laws of formation of the previous level systems. The systems formed at the previous level are the structural elements of the next level systems. The matrix of each level is created following the principle of step-and-level self-organization. The developed theory of spontaneous ordering of a matter systems – structural physics – allows finding laws of formation of structures, for example the law of the ordered growth of number of neutrons in the structural composition of nuclides.

Keywords: matter self-organization, self-organization levels, matter self-organization patterns, quarks.

Conference participants, National championship in scientific analytics,
Open European and Asian research analytics championship


К ВЫЯВЛЕНИЮ ЗАКОНОВ САМООРГАНИЗАЦИИ МАТЕРИИ

Алышева М.П., науч. сотр.
МАТИ – Российский государственный технологический
университет им. К.Э. Циолковского, Россия

В работе показывается, что, начиная с Большого взрыва, образование Вселенной происходило не хаотично, а упорядоченно по законам монотонно-скачкообразного развития или шагово-уровневой самоорганизации, основными положениями которой является развитие по законам уровней, отражаемых на особых упорядоченных матрицах. Законы образования структур систем следующего уровня опираются на законы образования систем предыдущего уровня, составляющими элементами систем следующего уровня являются системы, образованные на предыдущем уровне. Матрица каждого уровня создается по принципу шагово-уровневой самоорганизации. Разработанная теория спонтанного упорядочивания систем материи – структурная физика – позволяет находить законы образования структур, например закон упорядоченного роста числа нейтронов в структурном составе нуклидов.

Ключевые слова: самоорганизация материи, уровни самоорганизации, законы самоорганизации материи, кварки.

Участники конференции, Национального первенства по научной аналитике,
Открытого Европейско-Азиатского первенства по научной аналитике

 <http://dx.doi.org/10.18007/gisap:pmc.v0i5.1034>

Данная работа является выдержкой одной из глав подготовленной к изданию книги «Теория спонтанного упорядочивания структур на матрицах уровней развития», являющейся разделом нового направления – «структурной физики», рассматривающей лишь структуры различных объектов, начиная с кварков по уровням самоорганизации.

Согласно данной теории после Большого взрыва образовалось большое количество кварков, которые самоорганизуются в различные структуры по матрицам уровней. Развитие материи происходит по уровням самоорганизации, и каждому уровню соответствует своя особая упорядоченная матрица. Каждая матрица уровня содержит структуры уровня, образующиеся в соответствии с основным законом развития – монотонно-скачкообразным развитием или шагово-уровневой самоорганизацией. Монотонное образование структур отражается в строках матрицы, скачкообразное – в переходах от одной строки к следующей. Примером, где отражено монотонно-скачкообразное развитие структур является и Периодическая система – единственная систематизация структур по указанному выше принципу – систематизация химических элементов, разработанная гениальным русским ученым химиком Д.И. Менделеевым.

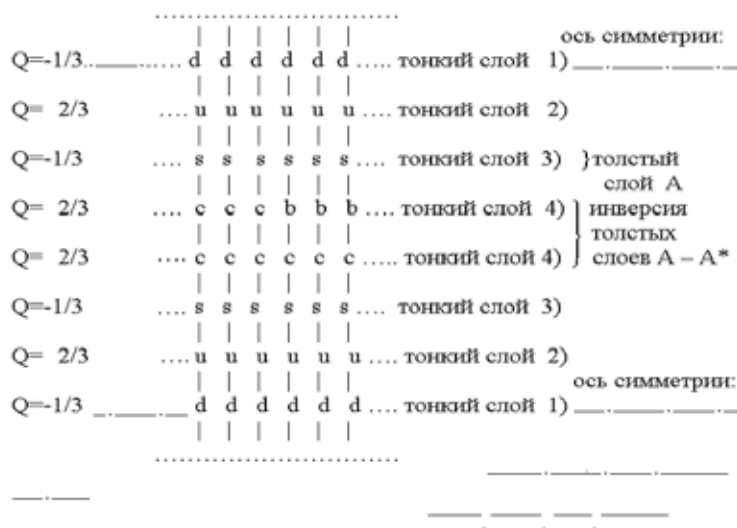


Рис. 1. Образование в кварковых облаках толстых слоев из нескольких тонких слоев
(кварки u, c, t имеют
положительные дробные электрические заряды $Q=2/3$,
кварки d, s, b имеют
отрицательные дробные электрические заряды $Q=-1/3$)

По принципу Периодической системы автором разработана систематизированная таблица всех нуклидов, позволяющая находить законы роста числа нейтронов в структурном составе нуклидов. Как показано в работе [2], число нейтронов периодически возрастает на определенную постоянную для нуклидов данного периода величину.

После Большого взрыва могли

образовываться большие соединения кварков – кварковые облака различной структуры. На рисунке 1 показана возможная структура соединения положительно и отрицательно заряженных кварков в виде тонких и толстых слоев большой протяженности.

Самоорганизация структур систем различного рода может быть представлена как граф-дерево с тупиковыми, т.е. не имеющими дальнейшего

развития системами на его ветвях. Тупиковой системой с соответствующей структурой является любая система, от которой нет дальнейшего развития. Так современные человекообразные обезьяны являются тупиковыми системами, а от их вымершего предка образовались и современные человекообразные обезьяны и человек.

По принципу тупиковых систем самоорганизовавшаяся структура уровня должна остаться как конечная – тупик, поэтому громадные массы черной материи могут представлять собой кварковые облака или другого рода скопления различной структуры. Известны водородные облака, но они относятся к тупиковым структурам третьего уровня развития.

Первым уровнем развития или самоорганизации являются структуры, состоящие из двух кварков – мезоны. на втором уровне появляются структуры, состоящие из трех кварков – барионы. На третьем уровне появляются структуры, состоящие более чем из трех кварков – они образуют кварковые кристаллы, описанные в работе [1], которые являются моделями структур нуклидов.

Структуры каждого из трех уровней образуются по одному и тому же закону упорядоченного расположения кварков в матрицах и следуют также законам образования структуры в матрице данного уровня. Для всех трех уровней одинаков закон образования структур, в транспонированных ма-

трицах. Найдены законы, по которым происходит образование кварковых кристаллов и закон периодического роста числа нейтронов в структурном составе нуклидов, упоминаемый выше, показывающий упорядоченность в образовании кварковых кристаллов и доказывающий упорядоченность развития структур в матрицах уровней.

Развитие структур по закону монотонно-скачкообразного развития или шагово-уровневой самоорганизации структур продолжает действовать и на следующих уровнях развития – структур, которые изучает химия биология и другие дисциплины. Это будет структурная химия, структурная биология и т.д. При этом структуры неживых систем отражены в матрицах, состоящих из арифметических прогрессий, а структуры живых систем – отражены в матрицах, состоящих из геометрических прогрессий.

Таким образом, развитие материального мира происходило и происходит не хаотично, а по законам спонтанного упорядочивания структур, отражаемого в особых упорядоченных матрицах на основе монотонно-скачкообразного развития структур или шагово-уровневой самоорганизации.

References:

1. Alysheva M.P. Samoorganizatsiya kvarkov v atomnykh yadrakh v osobye

- kvarkovye kristally (Model' atomnogo yadra s kristallicheskoj strukturoi iz kvarkov) [Self-organization of the quarks in the atomic nuclei into particular - quark crystals (model of the atomic nucleus with the crystal structure of quarks)] – Moskva., Publisher «LATMES», 1998. – 109 p.

2. Alysheva M.P. Zakon periodicheskogo rosta chisla neutronov v strukturnom sostave nuklidov [The Law of periodic growth of the number of neutrons in the structural composition of nuclides]., Nauchnye trudy (Vestnik MATI) [Scientific works (MATI Bulletin)], 2013, No. 20 (92)., pp. 259-275.

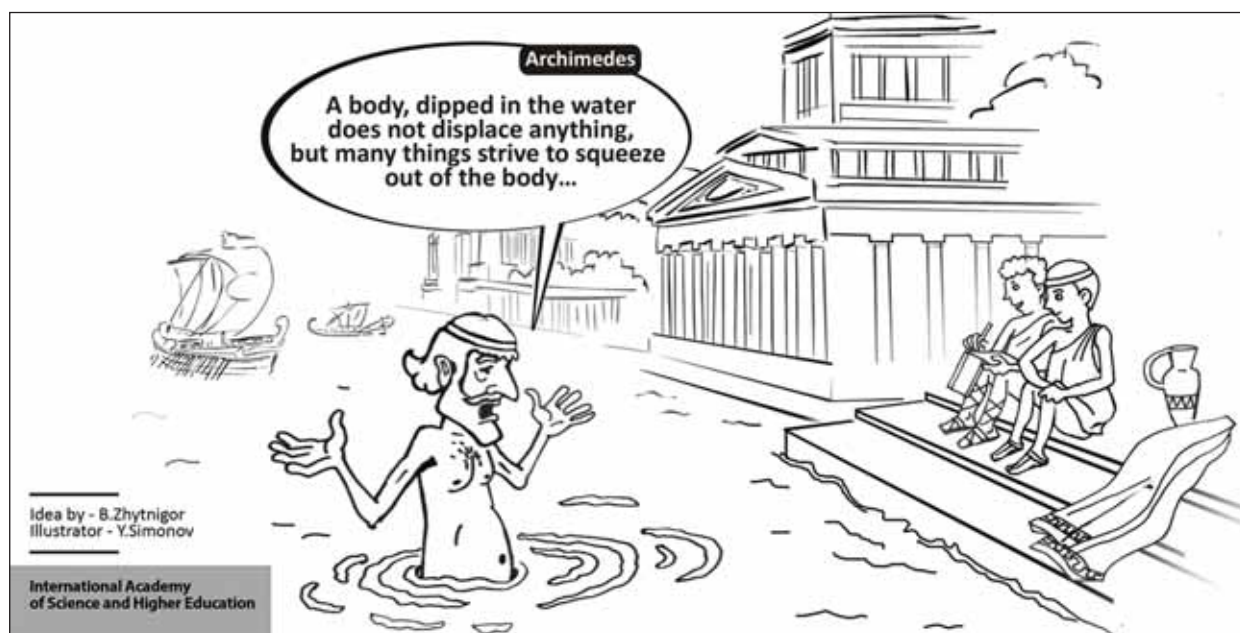
Литература:

1. Алышева М.П. Самоорганизация кварков в атомных ядрах в особые - кварковые кристаллы (Модель атомного ядра с кристаллической структурой из кварков). – М.: Изд-во «ЛАТ-МЭС», 1998. – 109 с.

2. Алышева М.П. Закон периодического роста числа нейтронов в структурном составе нуклидов. // Научные труды (Вестник МАТИ), 2013, № 20 (92). – С. 259-275.

Information about author:

1. Margarita Alysheva - research assistant, «MATI» - Russian State Technological University named after K.E. Tsiolkovsky; address: Russia, Moscow city; e-mail: onti@tech-atlas.net



OPTICAL WAVES INTRACAVITY INTERACTION IN DOMAIN STRUCTURES WITH QUADRATIC AND CUBIC NONLINEARITY

R.J. Kasumova, Doctor of Mathematics and Physics, Full Professor


G.A. Safarova, Master

Baku State University, Azerbaijan

A comparative analysis of efficiency of doubling and tripling processes of the laser radiation frequency in the regular domain structure has been made taking into account of the change of phases of all interacting waves. The investigations have been carried out for the case when the approximation of the given intensity of basic radiation is applied not to the regular domain structure as a whole, but to each separate domain. This allows making more precise analysis of wave interactions in similar structures.

Keywords: intracavity frequency conversion, given intensity approximation, regular domain structures.

Conference participants, National championship in scientific analytics,
Open European and Asian research analytics championship

 <http://dx.doi.org/10.18007/gisap:pmc.v0i5.1035>

Quasi-phase matched interactions of light waves are usually put into effect on the account of the nonlinear gratings specially created in solid medium. Realization of quasi-phase matched interactions of waves removes in essence one of crystal application restrictions in nonlinear optics – existence of wave synchronism or extends a field of applying the already used nonlinear crystals [1]. Thus, for instance, in crystal LiNbO_3 the tensor component of nonlinear susceptibility d_{33} , which may be used only in quasi-phase matched interactions, is of the greatest importance. In recent years there has been a break made in elaboration of a number of technologies of making crystals with periodical modulation of nonlinear susceptibility: obtaining the volumetric regular domain structures in the course of crystal growth, chemical diffusion through a periodical mask drawn in a lithographic way, post-growth over polarization of crystals through application of an electric field [2].

Currently, using quasi-phase matched interactions the coherent radiation from IR to UV range has been received [3-4]. Quasi-phase matching was used for creation of the sources of three basic colours (RGB sources) [5-7]. They use quasi-phase matched interaction at second harmonic generation for determining the quality of crystals. Elaboration of the small sources of a coherent radiation presents an actual problem of laser physics which may be solved using the newest achievements in this field and the modern methods in nonlinear optics [8-11].

Analysis of frequency of the tripling process in regular domain

structures at consecutive quasi-phase matched interaction has been presented in [12-14], where the constant-field approximation is mainly used. In addition to the layers with quadratic nonlinearity the direct third harmonic generation with the use of the layers of cubic nonlinearity is possible.

Investigation of quasi-phase matched interactions in the constant-intensity approximation [15] allows finding out a series of new effects absent in the constant-field approximation. The developed method of analyzing the impact of the task parameters on efficiency of proceeding wave processes allows one to set the optimum values of parameters for making an effective frequency converter on the basis of a periodical structure [16-18]. In the work [18] intracavity of quasi-phase matched generation of the second harmonic has been investigated.

In the present work with account of phase changes of all interacting waves a comparative analysis has been made in relation to efficiencies of laser radiation frequency of doubling and tripling processes in regular domain structure created from crystalline layers with quadratic and cubic nonlinearities. While making a theoretical analysis we take into account the reverse reaction of excited wave to pumping wave. The investigations have been carried out for the case when the constant-intensity approximation of basic radiation is applied not to the regular domain structure as a whole, but to each domain taken separately, what allows making more precise analysis of wave interactions in similar structures.

The reduced equations depicting

intracavity of third harmonic generation in this case with account of losses in a medium look as follows:

$$\begin{aligned} \frac{dA_1^\pm}{dz} \pm \delta_1 A_1^\pm &= \mp i\gamma_1 A_3^\pm (A_1^\pm)^2 \exp(\pm i\Delta z), \\ \frac{dA_3^\pm}{dz} \pm \delta_3 A_3^\pm &= \mp i\gamma_3 (A_1^\pm)^3 \exp(\mp i\Delta z), \end{aligned} \quad (1)$$

where $A_{1,3}^\pm$ – complex amplitudes of laser wave and third harmonic wave at corresponding frequencies of mains $\omega_{1,3}$ ($\omega_3 = 3\omega_1$) in the direction of z – axis (the plus sign) and direction opposite z – axis (the minus sign), $\Delta = k_3 - 3k_1$ – phase mismatch in each domain (domains are formed from the identical nonlinear layers and differ only with the direction of spontaneous polarizations), δ_j are absorption coefficients, γ_j are nonlinear coefficients for odd numbers of domains (γ'_j – for even numbers of domains) of interacting waves at the respective frequencies ω_j ($j = 1, 3$) [18]

$$\gamma_1 = (3\pi^2 / n_1 \lambda_1) \chi^{(3)}, \quad \gamma_3 = (3\pi^2 / n_3 \lambda_1) \chi^{(3)},$$

$n_{1,3}$ – refraction indices at frequencies $\omega_{1,3}$, λ_1 – wavelength of pump radiation.

The boundary conditions, with this, are as follows

$$\begin{aligned} A_{1,n}(z=0) &= A_{1,n-1}^{btx} \exp(i\varphi_{1,n}), \\ A_{3,n}(z=0) &= A_{3,n-1}^{btx} \exp(i\varphi_{3,n}). \end{aligned} \quad (2)$$

Here $z=0$ corresponds to an entry to the n -th domain, $A_{1,n}$ and $A_{3,n}$ – the complex amplitudes of laser wave and harmonic wave at entry to n -th domain, respectively, $A_{1,n-1}^{btx}$ and $A_{3,n-1}^{btx}$ complex amplitudes of laser and harmonic wave at the outlet from $(n-1)$ -th domain, $\varphi_{1,n}$ and $\varphi_{3,n}$ – phase changes on the boundary between $(n-1)$ -th and n -th domains, respectively, at frequencies $\omega_{1,3}$.

From the expression for complex amplitude of the third harmonic [17], obtained from the system (1) with account of the boundary conditions (2), it follows that the harmonic amplitude depending on length is a periodical function. First, at a distance of optimum length (coherent length) there occurs a transfer of basic radiation energy to harmonic energy. Then, the reverse transfer of energy takes place. With this, the coherent length of interaction is defined by the expression:

$$\ell_{coh}^{THG} = \frac{\pi/2}{\sqrt{3\Gamma_3^2 - (\delta_3 - 3\delta_1 - i\Delta)^2}}, \quad \Gamma_3^2 = \gamma_1\gamma_3 I_{10}^2 \quad (3)$$

For comparison, a coherent length of interaction ℓ_{coh}^{SHG} in a domain at the second harmonic generation is defined by the expression [16]:

$$\ell_{coh}^{SHG} = \frac{\pi/2}{\sqrt{2\Gamma_2^2 - (\delta_2 - 2\delta_1 - i\Delta)^2}}, \quad \Gamma_2^2 = \gamma_1\gamma_2 I_{10} \quad (4)$$

Analysis of the expressions (3) and (4) shows that in case of interaction of powerful laser fields with a regular domain structure variants are possible when in a cubic medium harmonic wave reaches the conversion maximum earlier than in a quadratic one, i.e. when $\ell_{coh}^{THG} > \ell_{coh}^{SHG}$. For instance, at equal levels of entry intensity of basic radiation in non-dissipative media at the second harmonic generation

the reduced coherent length of the first domain $\tilde{\ell}_{1,coh}^{SHG} = 0.5639$; length of the structure after the second domain is $\tilde{\ell}_{1,coh}^{SHG} + \tilde{\ell}_{2,coh}^{SHG} = 0.5639 + 0.5742 = 1.1381$; after the third domain the reduced length of domain structure is equal to $\tilde{\ell}_{1,coh}^{SHG} + \tilde{\ell}_{2,coh}^{SHG} + \tilde{\ell}_{3,coh}^{SHG} = 1.7396$; after the fourth domain - 2.3694; after the fifth one it makes up to 2.991, and after the sixth domain it reaches 3.5991 (for value of the reduced phase mismatch $\tilde{\Delta} = \Delta / \Gamma = 2.4$) (upper curve in the Figure).

In case of the third harmonic generation the reduced length of the first domain is $\tilde{\ell}_{1,coh}^{THG} = 0.5307$, structure length after the second domain is equal to $\tilde{\ell}_{1,coh}^{THG} + \tilde{\ell}_{2,coh}^{THG} = 1.9851$, after third - $\tilde{\ell}_{1,coh}^{THG} + \tilde{\ell}_{2,coh}^{THG} + \tilde{\ell}_{3,coh}^{THG} = 1.6923$, after the fourth is $\tilde{\ell}_{1,coh}^{THG} + \tilde{\ell}_{2,coh}^{THG} + \tilde{\ell}_{3,coh}^{THG} + \tilde{\ell}_{4,coh}^{THG} = 2.3463$, after the fifth $\tilde{\ell}_{1,coh}^{THG} + \tilde{\ell}_{2,coh}^{THG} + \tilde{\ell}_{3,coh}^{THG} + \tilde{\ell}_{4,coh}^{THG} + \tilde{\ell}_{5,coh}^{THG} = 3.0003$, and after the sixth domain the given length of a structure is equal to $\tilde{\ell}_{1,coh}^{THG} + \tilde{\ell}_{2,coh}^{THG} + \tilde{\ell}_{3,coh}^{THG} + \tilde{\ell}_{4,coh}^{THG} + \tilde{\ell}_{5,coh}^{THG} + \tilde{\ell}_{6,coh}^{THG} = 3.6074$ (lower curve in the Figure). From the calculated values of the coherent lengths of domains it follows that when the domain number of the layer increases, the domains expand.

Owing to fulfillment of quasi-phase matching conditions on the edge of domains the efficiency of

conversion to harmonic at the outlet of every domain acquires the maximum value. In addition, the efficiency in a quadratic medium monotonously increases from domain to a domain: $\eta_{2,max}(I_{1,coh}) = 0.1289$, $\eta_{2,max}(I_{2,coh}) = 0.3968$, $\eta_{2,max}(I_{3,coh}) = 0.6112$, $\eta_{2,max}(I_{4,coh}) = 0.8337$, $\eta_{2,max}(I_{5,coh}) = 0.8751$, $\eta_{2,max}(I_{6,coh}) = 0.8935$ (upper curve in the Figure). Similar values of efficiency in a cubic medium are equal to: $\eta_{3,max}(I_{1,coh}) = 0.1142$, $\eta_{3,max}(I_{2,coh}) = 0.3276$, $\eta_{3,max}(I_{3,coh}) = 0.4788$, $\eta_{3,max}(I_{4,coh}) = 0.6564$, $\eta_{3,max}(I_{5,coh}) = 0.7501$, $\eta_{3,max}(I_{6,coh}) = 0.7882$ (lower curve in the Figure).

At intracavity arrangement of a domain structure after reflection of laser resonator from the mirror the waves running in reverse direction are accompanied by further increase of conversion efficiency (compare efficiencies for domains 5, 6 and those for first four domains). This increase of conversion efficiency to harmonic is provided by fulfillment of optimum phase relation between the interacting waves [18].

Using the obtained analytical expressions for the task parameters in the constant-intensity approximation for each concrete experiment it is possible to calculate the optimum values of basic radiation intensity, coherent lengths of domains, phase mismatch between interacting waves of pumping and its harmonics. As it was expected, an account of losses in a medium leads to the weakening efficiency. The suggested method for analyzing the nonlinear wave interaction may be used for studying intracavity parametric interaction of nonlinear optical waves in similar structures.

This work was supported by the Science Development Foundation under the President of the Republic of Azerbaijan under grant № EIF-2010-1(1)-40/14-M-9.

References:

1. M.M. Fejer, G.A. Magel, D.H. Jundt, and R.L. Byer Quasi-phase-matched second harmonic generation: tuning and tolerances., IEEE J. Quantum Electron 28 (1992) 2631-2654.
<http://dx.doi.org/10.1109/3.161322>
2. G.D. Laptev, A.A. Novikov, A.S. Chirkin. Vzaimodejstvie sve-

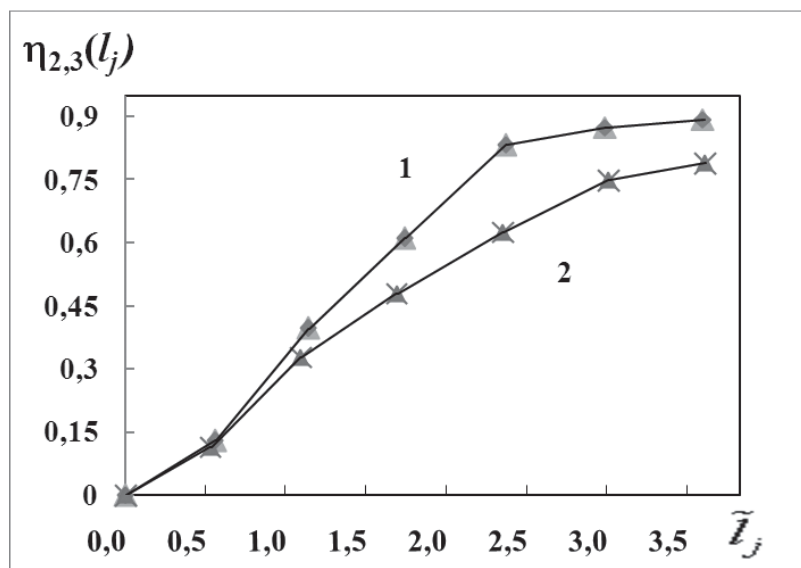


Fig. Dependence of efficiency of intracavity generation of the second and third harmonics on the length of a domain structure comprising two periods of "grating" of modulation of quadratic (upper curve 1) and cubic (lower curve 2) susceptibilities. $\tilde{\Delta} = \Delta / \Gamma = 2.4$, $\delta_{1,2,3} = 0$.

tovyh voln v aktivno-nelinejnyh i nelinejnyh kristallah s reguljarnoj domennoj strukturoj [The interaction of light waves in non-linear and active-non-linear crystals with a regular domain structure]., Pis'ma v Zhurnale Jeksperimental'noj i Teoreticheskoy Fiziki [Letters in the Journal of Experimental and Theoretical Physics]., Vol. 78., No. 1., 2003., pp. 45-58.

3. M.M. Fejer, in Beam Shaping and Control with Nonlinear Optics. - New-York., Plenum Press., 1998., p. 375.

4. R.L. Byer, Ousi-Phasematched Nonlinear interactions and devices., Journal of Nonlinear Optical Physics is Materials., Vol. 6, No. 4 (1997)., p. 549.

<http://dx.doi.org/10.1142/S021886359700040X>

5. J. Capmany. Simultaneous generation of red, green, and blue continuous-wave laser radiation in Nd³⁺ doped aperiodically poled lithium niobate., Applied Physics Letters., 78 (2001) 144-146.

<http://dx.doi.org/10.1063/1.1338495>

6. Z.W. Liu, S.N. Zhu, Y.Y. Zhu, H. Liu, Y.Q. Lu, H.T. Wang, N.B. Ming, X.Y. Liang, and Z.Y. Xu. A scheme to realize three-fundamental-colors laser based on quasi-phase-matching., Solid State Communications Vol. 119 (2001)., pp. 363-366.

[http://dx.doi.org/10.1016/S0038-1098\(01\)00255-1](http://dx.doi.org/10.1016/S0038-1098(01)00255-1)

7. M. Robles-Agudo, R.S. Cudney, and L.A. Rios. RGB source based on simultaneous quasi-phase-matched second and third harmonic generation in periodically poled lithium niobate., Optics Express, Vol. 14., Issue 22., 2006, pp. 10663-10668.

<http://dx.doi.org/10.1364/OE.14.010663PMid:19529472>

8. G.D. Laptev, A.A. Novikov. Vnutrirezonnatornoe kvazisinhronnoe samopreobrazovanie chastoty opticheskogo izlucheniya v kristalle Nd:Mg:LiNbO₃ s reguljarnoj domennoj strukturoj [Intracavity quasisynchronous self-transformation of frequency of the optical radiation in Nd:Mg:LiNbO₃ crystal with regular domain structure]., Kvantovaya

Elektron [Quantum Electronics].- Moscow., Vol. 31, No. 11 (2001)., pp. 981-986.

<http://dx.doi.org/10.1070/QE2001v031n11ABEH002087>

9. N.I. Kravtsov, G.D. Laptev, I.I. Naumova, A.A. Novikov, V.V. Firsov, A.S. Chirkin, Intracavity quasi-phase matched frequency summing in a laser based on a periodically poled active nonlinear Nd: Mg: LiNbO₃ (3) crystal., Kvantovaya Elektronika [Quantum Electronics]. - Moscow., Vol. 32., No. 10., 2002., pp. 923-924.

<http://dx.doi.org/10.1070/QE2002v032n03ABEH002174>

<http://dx.doi.org/10.1070/QE2002v032n10ABEH002318>

<http://dx.doi.org/10.1070/QE2002v032n06ABEH002244>

10. C.Q. Wang, Y.T. Chow, W.A. Gambling et al., Efficient self-frequency doubling of Nd:GdCOB crystal by type-I phase matching out of its principal planes., Optics Communications., Vol. 174 (2000)., pp. 471-474.

[http://dx.doi.org/10.1016/S0030-4018\(99\)00686-0](http://dx.doi.org/10.1016/S0030-4018(99)00686-0)

[http://dx.doi.org/10.1016/S0030-4018\(99\)00713-0](http://dx.doi.org/10.1016/S0030-4018(99)00713-0)

[http://dx.doi.org/10.1016/S0030-4018\(99\)00634-3](http://dx.doi.org/10.1016/S0030-4018(99)00634-3)

11. P. Dekker, J.M. Dawes, J.A. Piper et al., 1.1 WCW self-frequency-doubled diode-pumped Yb : YAl₃(BO₃) (4) laser., Optics Communications., 195 (2001)., pp. 431-436.

[http://dx.doi.org/10.1016/S0030-4018\(01\)01347-5](http://dx.doi.org/10.1016/S0030-4018(01)01347-5)

12. O. Pfister, J.S. Wells, L. Hollberg, L. Zink, D.A. Van Baak, M.D. Levenson, and W.R. Bozenberg. Continuous-wave frequency tripling and quadrupling by simultaneous three-wave mixings in periodically poled crystals: application to a two-step 1.19–10.71-μm frequency bridge., Optics Letters., Vol. 22., Issue 6., 1997., pp. 1211-1214.

<http://dx.doi.org/10.1364/OL.22.001211>

13. V.V. Volkov, G.D. Laptev, E.Yu. Morozov, I.I. Naumova, and A.S. Chirkin, Consecutive quasi-phase-matched generation of the third harmonic of the radiation from an Nd:YAG laser in a periodically poled Y:LiNbO₃ crystal., Kvantovaya Elektronika [Quantum

Electronics]. - Moscow., 25 (1998) 1046-1048.

<http://dx.doi.org/10.1070/QE1998v028n11ABEH001377>

14. Y. Qiang Qin, Y.Y. Zhu, C. Zhang, and N.B. Ming, Theoretical investigations of efficient cascaded third-harmonic generation in quasi-phase-matched and -mismatched configurations., Journal of the Optical Society of America B, Vol. 20., Issue 1., 2003., pp. 73-82.

<http://dx.doi.org/10.1364/JOSAB.20.000073>

15. Z.H. Tagiev, A.S. Chirkin, Given-intensity approximation in the theory of nonlinear waves., Zhurnal Jeksperimental'noj i Teoreticheskoy Fiziki [Journal of Experimental and Theoretical Physics]., Vol. 73 1977., pp. 1271-1282

16. Z.H. Tagiev, R.J. Kasumova, R.A. Salmanova, and N.V. Kerimova, Constant-intensity approximation in a nonlinear wave theory., Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics, Vol. 3, No. 3, 2001., pp. 84-87.

<http://dx.doi.org/10.1088/1464-4266/3/3/302>

17. Z.H. Tagiev, and R.J. Kasumova, Phase effects at second harmonic generation in the layer media., Optics Communications, Vol. 281., Issue 4., 2008., pp. 814-823.

<http://dx.doi.org/10.1016/j.optcom.2007.10.083>

18. Z.H. Tagiev, R.J. Kasumova, G.A. Safarova. Third-harmonic generation in regular domain structures., Journal of Russian Laser Research, Vol. 31., Issue 4., 2010., pp. 319-331.

<http://dx.doi.org/10.1007/s10946-010-9151-5>

19. R.J. Kasumova, A.A. Karimi. Intracavity quasi-phase-matched generation of optical frequencies. Fizika [Physics]., EA Fizika Institutu [Institute of Physics], 2009, XV, No. 4, pp. 102-105

Information about authors:

1. Rena Kasumova - Doctor of Mathematics and Physics, Full Professor, Baku State University; address: Azerbaijan, Baku city; e-mail: rkasumova@azdata.net

2. Gulnara Safarova - Master, Baku State University; address: Azerbaijan, Baku city; e-mail: rkasumova@azdata.net

PHYSICS OF FLUIDITY OF METAL SMELT

A. Vykhodets, Candidate of Technical science
Odessa National University named after I.I. Mechnikov,
Ukraine

Reaching the possibility to obtain details of a specified structure and quality characteristics remains a major technological challenge. At the same time the most important issue is the alloys flows crystallization determining the achievement of the required properties of metal taking into account its specific state.

Keywords: viscosity, crystallization, metal, process, speed, flow, phase

Conference participants, National championship in scientific analytics,
Open European and Asian research analytics championship


ФИЗИКА ЖИДКОТЕКУЧЕСТИ РАСПЛАВА МЕТАЛЛА

Выходец А.М. Канд. техн. наук, доцент
Одесский Национальный Университет
им. Мечникова, Украина

Достижение возможности получения деталей с заданной структурой и качественными характеристиками остается важнейшей технологической задачей. При этом главное место принадлежит вопросам кристаллизации потоков сплавов, определяющих достижение необходимых свойств металла с учетом конкретного его состояния.

Ключевые слова: вязкость, кристаллизация, металл, процесс, скорость, течение, фаза.

Участники конференции, Национального первенства по научной аналитике,
Открытого Европейско-Азиатского первенства по научной аналитике

 <http://dx.doi.org/10.18007/gisap:pmc.v0i5.1036>

Физика жидкотекучести является одним из менее изучавшихся вопросов. Между тем, вопросы перемещения жидкого металла находятся в центре внимания металлургов. Однако эти работы направлены на создание улучшенных конструкций технологических проб и связаны с экспериментальным определением жидкотекучести сплавов различного химического состава.

Впервые, уравнение для расчета жидкотекучести было предложено А. Вейником в виде:

$$\lambda = \alpha \frac{cd(\theta_s - \theta_c)}{\theta_s - \theta_\phi} + \beta \frac{dL}{\theta_s - \theta_\phi} \quad (1)$$

где α, β – коэффициенты, зависящие от свойств сплава, c, d – теплоемкость и плотность металла, d, L – скрытая теплота кристаллизации, θ – температура.

Ограниченные возможности этого уравнения очевидны [3]. Это – отсутствие связи с процессом кристаллизации и условиями течения металла. Следует отметить, что жидкотекучесть не может быть функцией перегрева в первой степени, то есть между теплоперепадом на металле и форме не может быть простой зависимости.

Определенный интерес представляет зависимость жидкотекучести от температурного интервала кристаллизации, предложенная в виде:

$$\lambda = A \frac{dc(t_{жс} - t_o) + L}{t_m - t_\phi} \quad (2)$$

Где, A – константа, зависящая от физико-химических и технологических свойств металла и формы, t – температура.

Следует обратить внимание на внешнее сходство выражений (1,2), сконструированных, по сути, из одних параметров. Следовательно, этим зависимостям присущи и общие недостатки.

Введено понятие нулевой жидкотекучести, точка которой соответствует отводу 20% теплоты кристаллизации. Однако это утверждение никак не обосновывается зависимостью от химического состава и условий затвердевания. Поэтому сами авторы признают трудности определения нулевой жидкотекучести и условий ее появления.

Известна зависимость длины заполнения пробы от диаметра канала и гидростатического напора металла. Принимая частное решение уравнения теплопроводности Фурье в виде интеграла ошибок Гаусса и полагая, что металл перестает течь, когда в нем образуется огромное количество взвешенных кристалликов, найдено, что жидкотекучесть определяется как [1]:

$$\lambda = 71D^{5/3} \left[\frac{dc(t_{жс} - t_o)}{4abt_n} \right]^{1/3} H_g \eta^{1/3} + 18 \frac{D^2 d^{3/2} v_{me} L H_g^{1/2}}{4abt_n \eta^{1/2}} \quad (3)$$

где: η – вязкость, D, H_g – диаметр канала и гидростатический напор, v_{me} – количество взвешенных кристалликов, a, b, n – постоянные.

Это уравнение было бы серьезным шагом в возможности количественной оценки жидкотекучести, в связи с установлением некоторой связи с процессом кристаллизации, если можно было бы определить неизвестные константы.

Важнейшей вехой в изучении жидкотекучести [2] железоуглеродистых сплавов явилось уравнение:

$$\lambda = \sqrt{\frac{2gH}{1 + \sum \xi_i}} \left[\frac{fc\gamma(T_{жс} - T_{жк})}{\alpha(T_s - T_\phi)P} + cH^2 R^2 \right] \quad (4)$$

где f, P – поперечное сечение и периметр потока, c, α – теплоемкость и коэффициент теплоотдачи металла, H – ферро статический напор, R – радиус стенки, заполняемой металлом, $\sum \xi_i$ – сумма коэффициентов, характеризующих местные сопротивления на пути потока.

Метод расчета по этой зависимости следует назвать гидравлическим, так как выражение (4) было получено в результате рассмотрения ньютоновской жидкости, исходя из того что остановка потока происходит из-за образования корки на носке, прочность которой превышает ферро статическое давление.

В действительности рассматривать металл как ньютоновскую жидкость можно только при значительном перегреве, так как является недопустимым пренебрежение реологическими свойствами в момент, близкий к затвердеванию. Что касается средних значений вязкости сплавов, то следует иметь в виду, что вязкость реологических железоуглеродистых сплавов имеет различную скорость изменения в зависимости от химического состава. Важность этого обстоятельства показана в (30), откуда следует, что чем выше перегрев, тем больше расхождение в расчетных и экспериментальных данных; показано, что при $T=1923^\circ K$ эта разница достигает 6 раз. Другим важным моментом является наличие

корки на носке потока, процесс образования которой рассматривается только как результат теплоперепада.

Так как вопрос о роли корочки на поверхности струи имеет принципиальный характер, то необходимо отметить, что это происходит тогда, когда весь объем металла близок к затвердеванию, и образование корки непосредственно, предшествует остановке потока, как результат необратимости процесса кристаллизации системы. Однако, образование корки связано с химическим составом железоуглеродистого сплава. Так, на сплавах эвтектического состава не наблюдается корочка на жидко-подвижной струе, а у сталей - наоборот. Очевидно¹, образование твердой корки на носке потока не является самостоятельным моментом, а составляет часть процесса общей кристаллизации, происходящей в результате теплообмена, который регулируется интенсивностью размещения.

Обобщая анализ уравнений жидкотекучести (1,2) необходимо сослаться на работу [3] где проведено сравнение, из которого следует, что

приведенные выше методики расчета не дают сопоставимых результатов.

Выводы. Несмотря на то, что подавляющее большинство работ по кристаллизации расплавов металлов относится к стационарным средам, в настоящее время уже известно, что не только звуковые колебания увеличивают частоту возникновения зародышей. В числе факторов, способствующих кристаллизации, следует назвать и макро потоки, так как поле давлений вокруг растущего кристалла зависит от общей скорости потока.

References:

1. Vykhodets A.M. Uravnenie konvektivnoi diffuzii dlya medlennogo potoka metalla [The convective diffusion equation for the slow flow of metal]. – Publisher. Vuzov. Chernaya metalurgiya [News of Universities. Ferrous metallurgy]., 1971., No. 5., pp. 162-165.
2. Vykhodets A.M. Otsenka zhidkotekesti zhelezouglerodistykh splavov. Liteinoe proizvodstvo, [Assessment of fluidity of iron-carbon

alloys. Foundry production]., 1971, No. 7, pp. 31-32

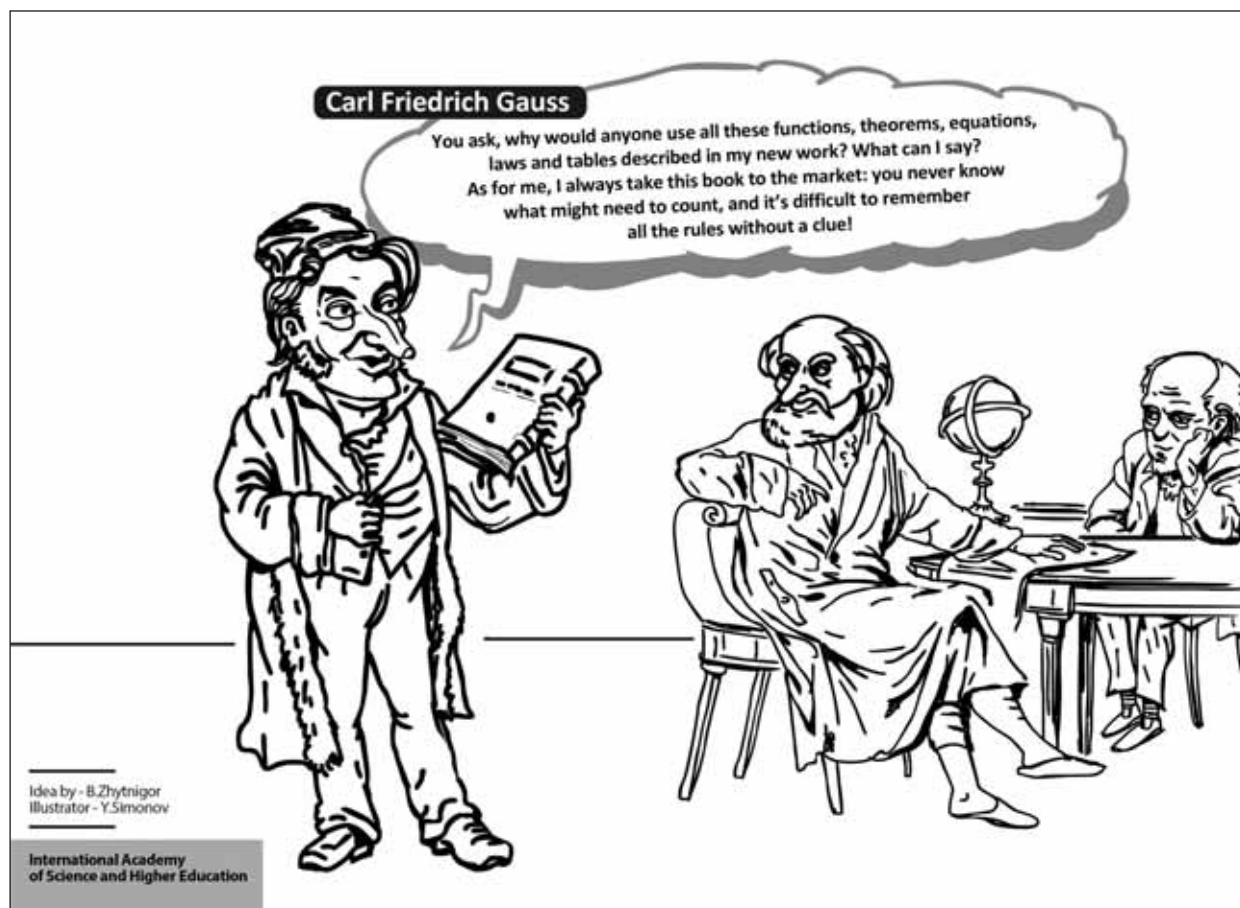
3. Vykhodets A.M. O lavinnom effekte kristallizatsii v rasplave. Metally [About the avalanche effect of the smelt crystallization. Metals]., 1973, No. 3, p. 238

Литература:

1. Выходец А.М. Уравнение конвективной диффузии для медленного потока металла. - Изв. Вузов. Черная металлургия. 1971, - № 5, - С. 162-165.
2. Выходец А.М. Оценка жидкотекучести железоуглеродистых сплавов. Литейное производство, 1971, №7, С. 31-32
3. Выходец А.М. О лавинном эффекте кристаллизации в расплаве. Металлы, 1973, № 3, С. 238

Information about author:

1. Aleksander Vykhodets – Candidate of Technical science, Odessa National University named after I.I Mechnikov; address: Ukraine, Odessa city; e-mail: elpidifor-av@yandex.ru



HIGGS BOSON DISCOVERED! WHAT IS NEXT?

Y.I. Khlopkov, Doctor of Mathematics and Physics, Full Professor
M.M. Zay Yar, Candidate of Mathematics and Physics, Doctoral Candidate
I. Agaeva, Master
A.Y. Khlopkov, Software Engineer
Moscow Institute of Physics and Technology, Russia

Higgs boson, peculiar catalyst of generation of mass of the Universe after the Big Bang, was theoretically predicted by the British physicist Peter Higgs in 1964. Experiments at the Large Hadron Collider on July 4, 2012, found the mysterious particle weigh of 125 of GeV/c² which was appeared boson by Higgs. What are the ways of further development of physics and our Universe? In this work, some scenarios of this development are considered.

Keywords: Higgs boson, Universe, Big Bang, universal constants, method of knowledge, classical and modern physics, mass, time and length of Planks, Buddhism, linguistics, Maxwell, Bartini, Einstein.

Conference participants, National championship in scientific analytics, Open European and Asian research analytics championship


ОТКРЫТ БОЗОН ХИГГСА! ЧТО ДАЛЬШЕ?

Хлопков Ю.И., д-р физ.-мат. наук, проф.
Зея М.М., канд. физ.-мат. наук, докторант
Агаева И., магистрант
Хлопков А.Ю., инженер-программист
Московский физико-технический институт, Россия

Хиггсон (Higgs boson), своеобразный катализатор образования массы Вселенной после Большого Взрыва, был предсказан английским физиком Питером Хиггсом теоретически в 1964 году. Эксперименты на Большом Адронном Коллайдере 4 июля 2012 года обнаружили таинственную частицу с массой 125 ГэВ/c², которая и оказалась бозоном Хиггса. Каковы пути дальнейшего развития физики, да и всей Вселенной? В работе рассматриваются некоторые сценарии этого развития.

Ключевые слова: бозон Хиггса, Вселенная, Большой взрыв, универсальные константы, методы познания, классическая и современная физика, масса, время и длина Планка, буддизм, Максвелл, Бартини, Эйнштейн.

Участники конференции, Национального первенства по научной аналитике, Открытого Европейско-Азиатского первенства по научной аналитике

 <http://dx.doi.org/10.18007/gisap:pmc.v0i5.1038>

В 1964 г Пензиас и Уилсон открыли совершенно неожиданный факт - Вселенная буквально пронизана микроволновым излучением. Теперь мы называем его реликтовым электромагнитным излучением и важным, хотя и косвенным, подтверждением теории Большого взрыва – лучшей на сегодняшний день теории о происхождении Вселенной. За то, что они поверили полученным данным, несмотря на их полную неожиданность, Пензиас и Уилсон получили Нобелевскую премию по физике за 1978 год.

Частица хиггсон (Higgs boson), своеобразный катализатор образования материи нашей Вселенной, был предсказан английским физиком Питером Хиггсом тоже в 1964 году. И только 4 июля 2012 в эксперименте на Большом Адронном Коллайдере была обнаружена таинственная частица с массой 125 ГэВ/c², которую через год признали бозоном Хиггса, что явилось дополнительным косвенным доказательством существования Большого взрыва и, за что Хиггс получил Нобелевскую премию по физике за 2013 год. Таким образом, благодаря экспериментам на адронном коллайдере современная физика приблизительно установила очертания нашей Вселенной. Открытие бозона Хиггса, его еще называют «частица Бога», обозначило



Рис. 1. Один из сценариев расширения Вселенной от Большого взрыва до наших дней.

нулевую точку отсчета нашей Вселенной. Но обострило целый ряд фундаментальных вопросов. В частности, остаются открытыми «извечные» вопросы физики: об ОТП (Общая Теория Поля), о главной неизвестной мировой константе, которая возможно позволит в будущем замкнуть ОТП и о конечной точке существования Вселенной. Даже нулевая точка отсчета Вселенной и реликтовым излучением, и бозоном Хиггса доказывается все-таки только косвенно. Для моде-

лирования Большого взрыва энергии адронного коллайдера в 10³ ГэВ все-таки недостаточно – необходимо, по крайней мере, на 16 порядков больше.

Согласно теории Большого взрыва, эволюция Вселенной зависит от экспериментально измеримого параметра – средней плотности вещества в современной Вселенной. Существуют два сценария эволюции. Если плотность не превосходит некоторого (известного из теории) критического значения, Вселенная будет расширяться

вечно, если же плотность больше критической, то процесс расширения когда-нибудь остановится и начнётся обратная фаза сжатия, возвращающая Вселенную к исходному сингулярному состоянию. Современные экспериментальные данные относительно величины средней плотности ещё недостаточно надёжны, чтобы сделать однозначный выбор между двумя вариантами будущего Вселенной. На рис. 1. представлен один из наименее раздражающих физиков сценариев расширения Вселенной от Большого взрыва до наших дней. Итак, мы живем примерно на 10^{18} секунде существования Вселенной от момента ее образования! Что будет дальше, мы не знаем и, научно обоснованно прогнозировать развитие ситуации возможности лишены. В таких случаях, как правило, идут двумя путями. Пытаются хотя бы грубо, например, линейно составить прогноз, либо полагаются на авторитеты, которые эти ситуации наверняка осмысливали, например, религиозных философов [1]. Начнем со второго.

В 1951 году Папа Римский Пий XII объявил, что теория Большого взрыва не противоречит католическим представлениям о создании мира. Известно, что в православии также существует положительное отношение к этой теории. Консервативные протестантские христианские конфессии также приветствовали теорию Большого Взрыва, как поддерживающую историческую интерпретацию учения о творении. Некоторые мусульмане стали указывать на то, что в Коране есть упоминания Большого взрыва. Согласно индуистскому учению, у мира нет начала и конца, он развивается циклично. В буддизме, например, также все происходит циклично и начало и конец Вселенной здесь конкретно связывается с дыханием Брахмы. Попробуем исследовать оба пути.

Вслед за религиозными философами предположим, что процессы во Вселенной и сама Вселенная имеют циклический характер и имеют начало и конец. В этом контексте начальную точку – Большой взрыв – мы установили.

Следуя рассуждениям Макса Планка [2], обратимся к фундаментальным понятиям нашего мира – ми-

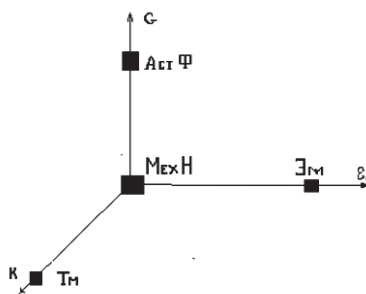


Рис. 2. Структура классической физики

ровым константам. Это некие таинственные константы, не следующие не из какой теории, а полученные, исключительно, экспериментально. Причем только с той точностью, какую дают испытательные приборы. Это довольно большая система констант, проявляющаяся в различных областях науки. Но лучше всего они изучены в физике. Причем некоторые из них лежат в основе целых научных дисциплин.

Так в основании всей классической механики лежит гравитационная константа Ньютона, им же и определенная экспериментально

$$G \approx 6.67 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/(\text{кг} \cdot \text{с}^2) \text{ [L}^0 \text{ T}^0\text{]} - \text{гравитационная постоянная.}$$

В основании термодинамики Кельвина-Томпсона, гидродинамики Эйлера, молекулярно-кинетической теории Больцмана лежит обратная числу Авогадро, постоянная Больцмана

$$k \approx 1.4 \cdot 10^{-23} \frac{\text{дж}}{\text{K}^0}$$

В основании электромагнитной теории лежат константы Максвелла $\epsilon_0 \approx 8.85 \cdot 10^{-12} \text{ Ф/м [L}^0 \text{ T}^0\text{]}$ – *электрическая постоянная и ее производная* $\mu_0 = c^2/\epsilon_0 \approx 1.26 \cdot 10^{-6} \text{ Г/м [L}^2 \text{ T}^2\text{]}$ – *магнитная постоянная*

В основании теории относительности Эйнштейна лежит константа $c \approx 2.99 \cdot 10^8 \text{ м/с [L}^1 \text{ T}^{-1}\text{]}$ – *скорость света*

В основании квантовой механики, ответственной за волновые свойства вещей лежит $\hbar \approx 1.05 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с [L}^5 \text{ T}^{-3}\text{]}$ – *постоянная Планка*

Здесь в квадратных скобках указана размерность констант в пространственном – [L] и временном – [T] мас-

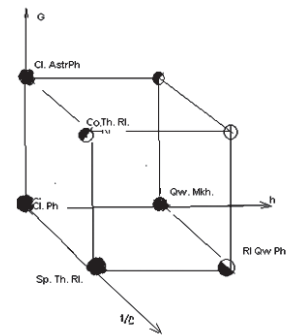


Рис. 3. Структура современной физики

штабах. Об этом мы поговорим ниже.

Мировые константы имеют настолько фундаментальное значение, что некоторые исследователи физику представляют на осях этих постоянных. Например, классическую физику наглядно представить на осях констант, каждая из которых отвечает за соответствующий раздел физики: в начале координат – механика Ньютона; по оси G – классическая гравитация, также разработанная Ньютоном; по оси ϵ_0, μ_0 – электродинамика Максвелла, k – термодинамика Томпсона, гидродинамика Эйлера и молекулярная физика Больцмана.

И современные физические теории можно наглядно представить на осях мировых констант Рис 3. По оси x отложим константу Планка - h, которая показывает, насколько в исследуемой области существенны волновые свойства материи. По оси y отложим гравитационную постоянную – G, показывающую степень важности гравитационного взаимодействия – Классическая Астрофизика - Cl. Astr. Ph. По оси z отложим константу, обратно пропорциональную скорости света 1/c. Эта ось будет характеризовать существенность релятивистских эффектов. В начале координат такой системы располагается там, где ей и положено быть - классическая физика Ньютона – Cl. Ph. Это мир, окружающих нас в обыденной жизни предметов, и в этой области не важны не гравитационные, за исключением ускорения свободного падения, не волновые, не релятивистские эффекты.

Классическая физика в настоящее время полностью завершена, находится в прекрасном соответствии с экспериментом и описывает широкий круг



Казимир Малевич перевернул представление о плоскости

А студент МФТИ перевернул представление о масштабах в нашей Вселенной – от тех, где квантуется время, до тех, когда горы плещутся, словно морские волны и величавые галактики плывут как серебристые облака.

явлений, включающий механику, завершённую ещё самим Ньютоном, термодинамику и молекулярную физику, гидродинамику, электродинамику Максвелла. Классическая гравитация, тоже открытая и сформулированная Ньютоном, также является завершённой теорией и идеально описывает строение Солнечной системы и практическую космонавтику – движение искусственных спутников Земли и других космических летательных аппаратов.

Квантовая механика прекрасно описывает волновые свойства материи, если не учитывать субсветовые скорости движения тел и мощное гравитационное поле. В стадии разработки находятся релятивистская квантовая механика, гравитационная теория относительности, квантовая астрофизика. И совершенно белым пятном является теория, объединяющая всю современную физику, та самая ОТП – Общая Теория Поля, о которой говорилось вначале. К слову, в списке Millenium Prize Problem \$ 1 млн. за решение, ОТП фигурирует как «Проблема Янга-Миллса. Вывод уравнений Общей Теории Поля». Возможно, уравнения Общей Теории Поля после того, как будет открыта новая мировая константа.

Планк рассматривал некоторые из мировых констант (G , c , h), участвующих в законах сохранения энергии и принципе неопределённости – основных законах современной физики

$$m \cdot c^2 = h \cdot \nu = G \frac{m^2}{l^2} \cdot l$$

$$l \cdot m \cdot c = h$$

Пользуясь этими соотношениями, Планк определил массу, которая впоследствии получила имя собственное

$$m_{pl} = \sqrt{\frac{h \cdot c}{G}} \quad 2,2 \cdot 10^{-8} \text{ кг } [L^3 t^2] -$$

масса Планка,

а также длину l_{min} и время t_{min} Планка

$$l_{min} = h / (m_{pl} \cdot c) \approx 1,6 \cdot 10^{-35} \text{ м}$$

$[L^1 t^0]$ – длина Планка

$$t_{min} = l_{min} / c \approx 5,4 \cdot 10^{-44} \text{ с}$$

$[L^0 t^1]$ – время Планка

По поводу смысла этих констант до сих пор не утихают научные дискуссии. Если по поводу длины Планка и времени Планка споры поутихли (договорились, что это минимальные пространственный 10^{-33} см и временной интервалы 10^{-44} с), то по поводу массы Планка 10^{-8} кг, споры ведутся до сих пор. 10^{-8} кг – это вполне осязаемая частица! У нас тоже есть на этот

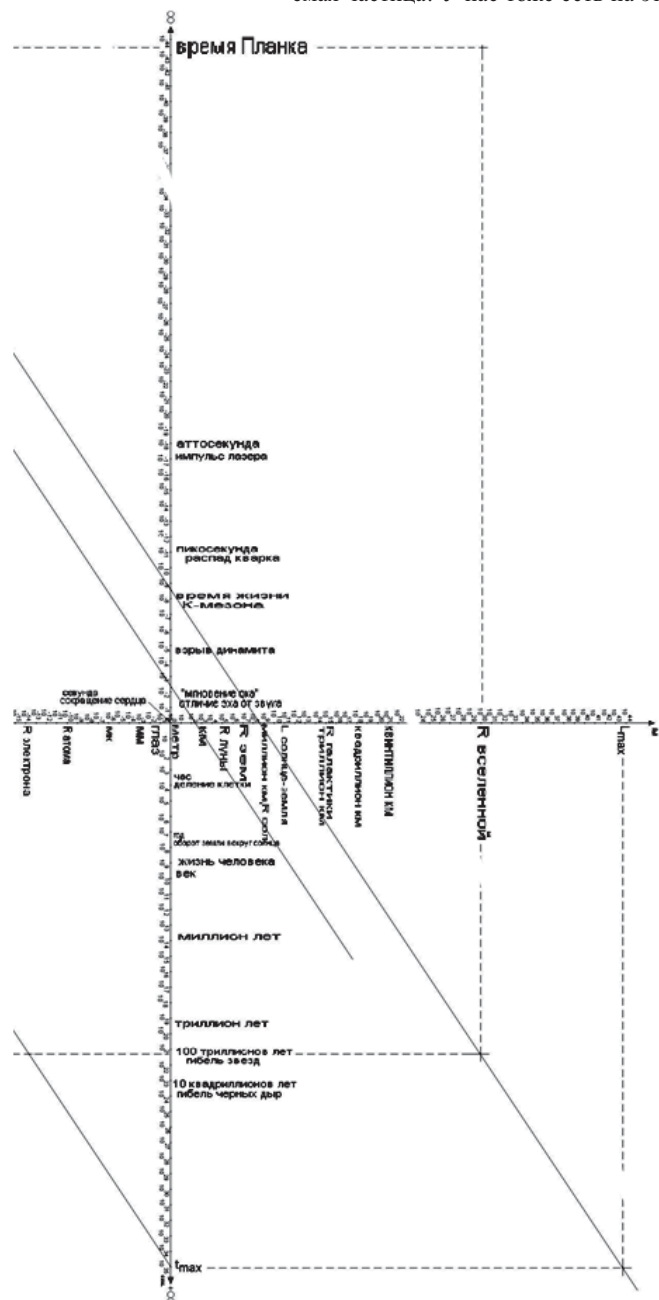


Рис. 4. Очертания Вселенной

счет свои соображения, но это не тема настоящей статьи.

Теперь вспомним о размерностях величин, стоящих в квадратных скобках. Размерности [L, T] для выполнения тех оценок, о которых говорилось вначале, очень удобны. Впервые их ввел в 1873 году Максвелл [3]. «Физическая величина является универсальной тогда и только тогда, когда ясна ее связь с пространством и временем». Категории пространства-времени становятся настолько основополагающими, что их изменение влечет за собой изменение общего подхода к описанию явлений природы. Одно из них – осознание того, что масса есть одна из форм энергии, выраженное великим уравнением $E = mc^2$.

Второе – это то, что теория относительности делает пространственно-временной язык описания физических процессов абсолютным и обосновывает формальный приём Максвелла – выражения всех физических величин в размерностях пространства – L и времени – T. Этими координатами пользовались Пуанкаре, Бор, Эйнштейн, Вернадский. Известный советский физик и авиаконструктор Роберт Бартини привел размерности L и T в систему. [4]. Кстати, масса в этих координатах имеет размерность $[L^3 T^{-2}]$. По аналогии с рассуждениями Планка максимальные пространственные и временные интервалы, составленные

из мировых констант $l_{\max} = 10^{44}$ а и $t_{\max} = 10^{35}$, что, кстати, соответствует условию симметрии.

References:

1. Khlopkov Yu. I., Zeya M'o M'int, Khlopkov A. Yu. Analiz yazykov nauki, iskusstva i religii pri poluchenii novogo znaniya [Analysis of the language of science, art and religion at the preparation of new knowledge], Materials digest of LXX International Research and Practice Conference "Language means of preservation and development of cultural values". – London., IASHE, November 14-20, 2013.
2. Maks Plank i filosofiya [Max Planck and Philosophy], Collection of the articles. Translated from german. – Moscow., Foreign litreture, 1963. – 63 p.
3. Dzh. K. Maksvell. Traktat ob elektrichestve i magnetizme [A Treatise on Electricity and Magnetism]. – Moscow., Nauka [Science], 1989.
4. Bartini R. Kinematicheskaya sistema fizicheskikh velichin [The kinematic system of physical quantities], DAN SSSR, No. 4, 1965.

Литература:

1. Хлопков Ю. И., Зея Мью Мьинт, Хлопков А. Ю. Анализ языков науки, искусства и религии при получении нового знания // Materials digest of

LXX International Research and Practice Conference "Language means of preservation and development of cultural values". – London: IASHE, Nov 14-20, 2013.

2. Макс Планк и философия: Сб. статей / Пер. с нем.. – М.: Иностр. лит-ра, 1963. – 63 с.
3. Дж. К. Максвелл. Трактат об электричестве и магнетизме. – М.: Наука, 1989.
4. Бартини Р. Кинематическая система физических величин. ДАН СССР, № 4, 1965.

Information about authors:

1. Yuri Khlopkov - Doctor of Mathematics and Physics, Full Professor, Moscow Institute of Physics and Technology; address: Russia, Zhukovsky city; e-mail: khlopkov@falt.ru
2. Myo Myint Zay Yar - candidate of mathematics and physics, doctoral candidate, Moscow Institute of Physics and Technology; address: Russia, Zhukovsky city; e-mail: zayyarmyomyint@gmail.com
3. Ilakha Agaeva – Master, Moscow Institute of Physics and Technology; address: Russia, Zhukovsky city; e-mail: khlopkov@falt.ru
4. Anton Khlopkov - Software Engineer, Moscow Institute of Physics and Technology; address: Russia, Zhukovsky city; e-mail: khlopkov@falt.ru



THERMODYNAMICS, BARODYNAMICS
AND HORODYNAMICS

G. Simonian, Candidate of Chemistry, Associate Professor
Yerevan State University, Armenia

The author offers horodynamics for deep subterranean systems (like hydrocarbon reservoirs) as an alternative to thermodynamics and barodynamics.

Keywords: system, thermodynamics, Shestopalov's barodynamics, Simonian's horodynamics, oil reservoir, oil

Conference participants, National championship in scientific analytics, Open European and Asian research analytics championship


ТЕРМОДИНАМИКА, БАРОДИНАМИКА
И ХОРОДИНАМИКА

Симонян Г.С., канд. хим. наук, доцент
Ереванский государственный университет, Армения

В статье в качестве альтернативы термодинамике и бародинамике приводится хородинамика для глубоких подземных систем, например, коллекторов углеводородов.

Ключевые слова: система, термодинамика, бародинамика Шестопалова, хородинамика Симоняна, нефтяной коллектор, нефть.

Участник конференции, Национального первенства по научной аналитике, Открытого Европейско-Азиатского первенства по научной аналитике

 <http://dx.doi.org/10.18007/gisap:pmc.v0i5.1039>

При изучении материального мира принято мысленно или реально выделять исследуемый объект и называть системой, а все остальное рассматривать как окружающую среду или внешний мир. Система - это часть Вселенной, которую мы выделяем для исследования. Система - совокупность элементов со связями между ними, подчиняющимся соответствующим законам композиции. Система взаимодействует с внешним миром как единое целое. Каждый элемент системы внутри себя считается неделимым. Элементный состав может содержать однотипные (гомогенные системы) и разнотипные (гетерогенные системы) элементы. Элементы могут быть вещественные, энергетические и информационные. Система может быть изолирована от внешнего мира или взаимодействовать с ней [1.2].

Термодинамическая система — выделяемая (реально или мысленно) для изучения - макроскопическая физическая система, состоящая из большого числа частиц и не требующая для своего описания привлечения микроскопических характеристик отдельных частиц. По характеру взаимодействия с окружающей средой различают системы:

- открытые;
- закрытые;
- изолированные;
- адиабатически изолированные.

Открытые системы могут обмениваться с окружающей средой энергией, веществом и, что не менее важно, информацией.

Закрытая система — термодинамическая система, которая может обмениваться с окружающей средой теплом и энергией, но не веществом.

Изолированная система (замкнутая система) — термодинамическая система, которая не обменивается с окружающей средой ни веществом, ни энергией. В термодинамике постулируется, что изолированная система постепенно приходит в состояние термодинамического равновесия, из которого самопроизвольно выйти не может.

Адиабатически изолированная система — термодинамическая система, которая не обменивается с окружающей средой энергией в форме теплоты. Изменение внутренней энергии такой системы равно производимой над ней работе. Всякий процесс в адиабатически изолированной системе называется адиабатическим процессом.

Для описания термодинамической системы используются макроскопические параметры, характеризующие свойства самой системы: температуру, давление, массу и химический состав компонентов, магнитную индукцию, электрическую поляризацию и др.

Термодинамические системы изучает термодинамика (греч. θερμη — «тепло», δυναμις — «сила») — раздел физики и физической химии, изучающий соотношения и превращения теплоты и других форм энергии. Таким образом, в термодинамике изучаются физические системы, состоящие из большого числа частиц и находящиеся в состоянии термодинамического равновесия или близком к нему. Термодинамика занимается изучением *макроскопических* систем, *пространственные* размеры которых и *время существования* достаточны для проведения нормальных процессов измерения.

Термодинамика не рассматривает особенности строения тел на молеку-

лярном уровне. Равновесные состояния термодинамических систем могут быть описаны с помощью небольшого числа *макроскопических* параметров, таких как температура, давление, объём, масса, плотность, концентрации компонентов и т. д., которые могут быть измерены макроскопическими приборами.

Описанное таким образом состояние называется *макроскопическим состоянием*, и законы термодинамики позволяют установить связь между макроскопическими параметрами. Если параметр имеет одно и то же значение, не зависящее от размера любой выделенной части равновесной системы, то он называется *неаддитивным* или *интенсивным*, если же значение параметра пропорционально размеру части системы, то он называется *аддитивным* или *экстенсивным*. Давление и температура — неаддитивные параметры, а объём и масса — аддитивные параметры.

Макроскопические параметры могут подразделяться на внутренние, характеризующие состояние системы как таковой, и внешние, описывающие взаимодействие системы с окружающей средой и силовыми полями, воздействующими на систему.

Таким образом, при описании макросостояний системы используются *функции состояния* — это функции, однозначно определённые в состоянии термодинамического равновесия и не зависящие от предыстории системы и способа её перехода в равновесное состояние. Состояние термодинамической системы, когда все её параметры при неизменных внешних условиях не изменяются со временем, называют **равновесным**.

Важнейшими функциями состояния газа являются давление, температура и объем.

Температура - внешняя характеристика скоростей частиц газа. За меру температуры принято брать среднюю кинетическую энергию поступательного движения молекул.

Давление - внешняя характеристика соударений со стенками, например, сосуда. Мера силы, которая действует на единицу поверхности.

Объем - место, куда заключены частицы газа. Газ занимает весь предоставленный ему объем.

Однако функции состояния не являются независимыми, и для одно-родной изотропной системы любая термодинамическая функция может быть записана как функция двух независимых переменных. Такие функциональные связи называются уравнениями состояния. Уравнение состояния идеального газа называется уравнением Клапейрона — Менделеева и записывается как $PV = \nu RT$, где P — давление, V — объем, T — абсолютная температура, ν — число молей газа, а R — универсальная газовая постоянная.

Изотермический или изотермный процесс (от др.-греч. ἴσος «равный» и θερμ — «тепло») - процесс, происходящий в физической системе при постоянной температуре и постоянной массе идеального газа.

$$T = \text{const}, PV = \text{const}.$$

Это **закон Бойля — Мариотта**. При постоянной температуре и массе газа произведение давления газа на его объем постоянно.

Очевидно, что если индексом 1 обозначить величины, относящиеся к начальному состоянию газа, а индексом 2 — к конечному, то приведенную формулу можно записать в виде $P_1 V_1 = P_2 V_2$

Изобарный процесс (др.-греч. ἴσος «одинаковый» и βάρος «тяжесть») — процесс, происходящий в системе при постоянном давлении и постоянной массе идеального газа.

$$P = \text{const}, V / T = \text{const}.$$

$$V \sim T$$

Закон Гей-Люссака. При постоянном давлении объем постоянной массы газа пропорционален абсолютной температуре.

Если известно состояние газа при

неизменном давлении и двух разных температурах, закон может быть записан в следующей форме:

$$V_1 / T_1 = V_2 / T_2 \text{ или } V_1 T_2 = V_2 T_1.$$

Изохорический или изохорный процесс (от др.-греч. ἴσος «равный» и χώρος «место») — процесс, который происходит при постоянном объеме и постоянной массе идеального газа.

$$V = \text{const}, P / T = \text{const}.$$

Закон Шарля. При постоянном объеме давление постоянной массы газа пропорционально абсолютной температуре.

$$P_1 / T_1 = P_2 / T_2 \text{ или } P_1 T_2 = P_2 T_1$$

$$P_1 V_1 / T_1 = P_2 V_2 / T_2$$

Бародинамика (греч. βάρος — «тяжесть», δύναμις — «сила») это изобретение Шестопалова Анатолия Васильевича [3]. Если в термодинамике все происходит под действием температуры, то в бародинамике Шестопалова все процессы протекают под действием давления, отсюда у него свои собственные псевдоагрегатные состояния вещества и фазовые переходы типа плавления, кипения, сублимации и конденсации.

Хородинамика (греч. χώρος — «место», δύναμις — «сила») это мое изобретение. Это процессы, которые протекают в подземных системах при изохорных условиях. Термин хор на армянском языке означает: глубина и замкнутое пространство в глубине-яма.

В изохорных условиях находятся, например, коллекторы углеводородов и ловушки нефти и газа [4-6]. Коллектор углеводородов- это горная порода, содержащая пустоты (поры, каверны или системы трещин) и способная вмещать и фильтровать флюиды, например, нефть, газ и воду. Следует отметить, что коллекторами нефти и газа являются как терригенные — алевриты, песчаники, алевриты и некоторые глинистые породы, так и хемогенные и биохемогенные — известняки, мел и доломиты, а также смешанные породы. Таким образом, коллекторами служат пласты и выклинивающиеся залежи песков, песчаников, известняков и доломитов. Для сохранения нефти и газа в коллекторе последний должен быть сверху и снизу изолирован непроницаемыми породами, обычно глинами. Ловушка нефти и газа - часть коллек-

тора, условия залегания которого и взаимоотношения с экранирующими породами обеспечивают возможность накопления и длительного сохранения нефти или газа. Элементами ловушки являются коллектор нефти и газа, покрывка и экран. Хородинамическая система обладает фрактальностью [7] и синергичностью [8]. Хородинамическая система также может быть открытой, замкнутой и изолированной.

References:

1. Druzhinin V.V., Kontorov D.S. Problemy sistemologii. Problemy teorii slozhnykh sistem [Problems of systemology. Problems of the complex systems theory]. – Moskva., Sov. Radio [Soviet Radio], 1976. – 296 p.
2. Etkins P. Fizicheskaya khimiya (Perevod s angliiskogo) [Physical Chemistry (Translated from English)] – Moskva., Mir [World], 1980. – 293 p.
3. Chto takoe barodinamika? [What is barodynamics?], Available at: <http://barodinamika.livejournal.com/46103.html>
4. Olenin B.B., Neftgeologicheskoe raionirovanie po geneticheskomu printsipu [Geological zoning of oil fields on the basis of genetic principles] – Moskva., 1977. – 224 p.
5. Simonyan G.S. Novyi mekhanizm obrazovaniya tverdoi korki na granitse voda-neft' v neftyanom kollektore. Mezhdunarodnyi zhurnal prikladnykh i fundamental'nykh issledovaniy [A new mechanism for the formation of a hard crust on the water-oil border in the oil reservoir. International Journal of Applied and Fundamental Research]. – 2013., No. 10., Part 3., p. 505.
6. Simonyan G.S. Geoekologicheskie aspekty povysheniya nefteotdachi plastov. Problemy i perspektivy razvitiya geologicheskogo klastera: Obrazovanie-nauka-proizvodstvo: trudy Mezhdunarod. nauch.-prakt. konf. [Geoenviromental aspects of the enhanced oil recovery. Problems and prospects of the geological cluster development: Education-science-production: the works of the International. scientific and practical conference]. - Almaty, 7-8 February 2014., KazNTU., 2014., pp. 62-65.
7. Simonyan G.S. Fraktal'nost' rud i neftnykh zalezhei Cbornik nauchnykh dokladov Sovremennaya

nauka [Fractal ore and oil deposits. Collection of scientific papers: Modern science], Novye perspektivy Bydgoshch (30.01.2014-31.01.2014) – Warszawa., Wydawca: Sp. z o.o. „Diamond trading tour“, 2014, pp. 56-60.

8. Simonyan G.S. Analiz sostoyaniya naftidnykh sistem v svete sinergicheskoi teorii informatsii. Sovremennye naukoemkie tekhnologii [The analysis of oil systems in the light of the synergistic information theory. Modern science intensive technologies]. – 2014., No. 4., pp. 108-113.

Литература:

1. Дружинин В.В., Конторов Д.С. Проблемы системологии. Проблемы теории сложных систем. – М., Сов. радио, – 1976. – 296 с.

2. Эткинс П. Физическая химия (Перевод с английского) – М., Мир, –1980. –293с.

3. <http://barodinamika.livejournal.com/46103.html>

4. Оленин В.Б., Нефтегеологическое районирование по генетическому принципу– М., –1977.–224с.

5. Симонян Г.С. Новый механизм образования твердой корки на границе вода-нефть в нефтяном коллекторе. // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. –2013. –№10. –Часть 3.– С.505.

6. Симонян Г.С. Геоэкологические аспекты повышения нефтеотдачи пластов. Проблемы и перспективы развития геологического кластера: Образование-наука-производство: труды Международ. науч.-практ. конф., Алматы, 7-8 февраля 2014 г. Алматы., КазНТУ. – 2014. – С. 62- 65.

7. Симонян Г.С. Фрактальность руд и нефтяных залежей Сборник научных докладов Современная наука. Новые перспективы Быдгощ (30.01.2014 - 31.01.2014) - Warszawa: Wydawca: Sp. z o.o. «Diamond trading tour».–2014. – С.56-60.

8. Симонян Г.С. Анализ состояния нафтидных систем в свете синергической теории информации // Современные наукоемкие технологии.– 2014.– №4.– С. 108-113.

Information about authors:

1. Geworg Simonian - Candidate of Chemistry, Associate Professor, Yerevan State University; address: Armenia, Yerevan city; e-mail: sim-gev@mail.ru



INTERNATIONAL ACADEMY OF INTELLECT AND QUALITATIVE PROGRESS

CERTIFICATION «ICSQ-775»

- ◆ Standart certification
- ◆ Operative certification



PATENTING IOSCEAAD-775

- ◆ Standart patenting
- ◆ Operative patenting



ACCREDITATION

- ◆ Authoritative accreditation
- ◆ Procedural accreditation
- ◆ Status accreditation
- ◆ Membership accreditation
- ◆ Expert accreditation



<http://academy.iuci.eu>

SORPTION PURIFICATION OF WATERS USING THE SLAG ADSORBENT

E. Khobotova, Doctor of Chemistry, Full Professor
I. Grayvoronskaya, Postgraduate student
Kharkiv National Automobile and Highway University,
Ukraine

The elemental, oxide, mineralogical and radionuclide composition of metallurgical slags is determined. The class of radiation danger of the studied industrial wastes is carried out. The principles of metallurgical slag fractions sorption activity determination are substantiated theoretically and experimentally. Optimum conditions of chemical activation of slag, type of functional groups, charge and morphological characteristics of sorbent's surface are defined. The dependences of quantitative indicators on the adsorption process parameters which have the implication for slag sorbents utilization in production environment are determined. The mechanism and kinetic properties are determined and adsorption equations are derived.

Keywords: metallurgical slag, chemical activation, sorbent, adsorption

Conference participants, National championship in scientific analytics,
Open European and Asian research analytics championship


СОРБЦИОННАЯ ОЧИСТКА ВОД ШЛАКОВЫМ АДсорбЕНТОМ

Хоботова Э.Б., д-р хим. наук, проф.
Грайворонская И.В., аспирант
Харьковский национальный автомобильно-дорожный
университет, Украина

Определен элементный, оксидный, минералогический и радионуклидный состав металлургических шлаков. Установлен класс радиационной опасности исследуемых промышленных отходов. Теоретически и экспериментально обоснованы принципы определения сорбционной активности металлургических шлаков. Определены оптимальные условия химической активации шлака, природа функциональных групп, заряд и морфологические особенности поверхности частиц сорбента. Установлены зависимости количественных показателей адсорбции от параметров процесса, которые имеют значения для использования шлаковых сорбентов в производственных условиях. Определены механизм, кинетические характеристики и выведены уравнения адсорбции.

Ключевые слова: металлургический шлак, химическая активация, сорбент, адсорбция

Участники конференции, Национального первенства по научной аналитике,
Открытого Европейско-Азиатского первенства по научной аналитике

 <http://dx.doi.org/10.18007/gisap:pmc.v0i5.1040>

Улучшение экологической ситуации промышленных регионов возможно за счет использования крупнотоннажных промышленных отходов (ПО). Внедрение малоотходных технологий стимулирует реализацию мероприятий по охране окружающей среды: ликвидацию отвалов ПО, выявление ресурсной ценности и полезных свойств ПО, обоснование целесообразности их утилизации в качестве технических материалов и сорбентов при очистке сточных вод. Экологическая безопасность обеспечивается путем предотвращения сброса сточных вод при внедрении систем оборотного водопотребления предприятий, частичной ликвидации отвалов металлургических шлаков как ПО при их использовании в качестве сорбционного материала и последующей утилизации отработанных шлаковых сорбентов в дорожной отрасли.

Цель работы – минимизация накопления ПО и сточных вод путем безопасного использования металлургических шлаков как техногенного сырья в технологиях сорбционной очистки питьевых и промышленных сточных вод.

Задачи исследования:

– определение элементного, минералогического и радионуклидного составов шлаков и изменений морфоло-

гии поверхности частиц в различных условиях;

– выявление корреляции между условиями активации шлаков и изменением природы поверхностных функциональных групп, увеличением скорости адсорбции и сорбционной активности по ряду органических веществ, оптимизация кислотного интервала очищаемых вод, что обеспечивает повышение эффективности адсорбции;

– изучение кинетических характеристик процесса адсорбции органических соединений шлаковыми адсорбентами и количественное описание процесса адсорбции;

– исследование процессов десорбции сорбатов из шлаков;

– разработка схем замкнутого водопотребления при использовании сорбционной очистки шлаковыми адсорбентами.

Объект исследования – адсорбция шлаками ООО Побужского ферроникелевого комбината (ПФНК), ПАО Никопольского завода ферросплавов (НЗФ) и ОАО «Арселор-Миттал Кривой Рог» органических загрязнителей питьевых и промышленных сточных вод для обеспечения экологической безопасности. В качестве сорбатов исследованы органические красители: метиленовый си-

ний (МС), метилвиолет (МВ), Конго Красный (КК); ароматические соединения: фенол, *n*-нитрофенол, анилин, *n*-нитроанилин; ПАВ: анионоактивный ПАВ (АПАВ) – натриевая соль додецилсульфокислоты $C_{12}H_{25}OSO_3Na$, катионоактивный ПАВ (КПАВ) входит в состав препарата Polygram.

Предмет исследования – корреляция между оксидным, минералогическим составом фракций техногенного сырья, видом ее активации и количественными показателями адсорбции, характеризующие ресурсную ценность металлургических шлаков как адсорбентов.

Экспериментальные методы исследования позволили достоверно определить состав металлургических шлаков и прогнозировать их свойства в качестве сорбентов органических соединений. Изучение свойств и модификации техногенного сырья требует комплексного подхода, включающего рентгенофазовый, петрографический, гамма-спектрометрический анализ и электронно-зондовый микроанализ. Минералогический состав техногенного сырья определено с помощью рентгенофазового и петрографического анализа. Элементный состав и морфология поверхности частиц шлаков исследованы методом электронно-зондового микроанализа на сканирующем

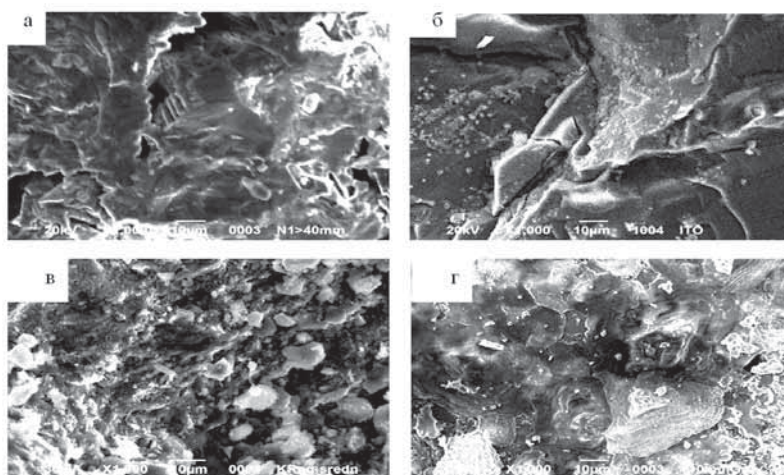


Рис. 1. Микрофотографии поверхности частиц: а – фракции шлака >20 мм ПФНК; б – шлака НЗФ производства FeSi; в, г – доменного шлака «АрселорМиттал»: в – отвального, средняя проба; г – гранулированного, фракция >10 мм. Увеличение 1000

электронном микроскопе. Гамма-спектрометрическим методом установлены показатели радиационной активности шлаков. Природа и состояние поверхностных функциональных групп шлаковых частиц определялись с помощью ИК-спектрофотометрии. Адсорбционные свойства образцов определены методами: спектрофотометрическим, хроматографическим, флуориметрическим и общего углерода. Вымывание собственных компонентов шлака в раствор и процессы десорбции поглощенных сорбатов исследованы методом капиллярного электрофореза.

Методом воздухопроницаемости определены удельные поверхности (S) фракций шлаков < 0,63 мм: шлак НЗФ $S = 880 \text{ см}^2/\text{г}$; шлак «АрселорМиттал» $S = 1625 \text{ см}^2/\text{г}$. Удельная поверхность шлака ПФНК рассчитана по значению, соответствующему максимуму изотермы адсорбции: $S = 4000 \text{ см}^2/\text{г}$. Фракционный состав шлака ПФНК от 0,315 до 3,0–2,5 мм.

В качестве методов исследований сорбционных свойств шлаков по отношению к органическим соединениям различных классов выбраны спектрофотометрический, хроматографический, флуориметрический, капиллярного электрофореза и определения содержания общего углерода, позволяющие определить концентрации органических сорбатов в широких интервалах концентраций.

Химический состав шлаков. Рентгенофазовым анализом в соста-

ве шлака ПФНК обнаружен минерал диопсид $\text{CaMg}(\text{SiO}_3)_2$, слоистая структура которого способствует к проявлению им сорбционных свойств [1]. Образец, обработанный водой на протяжении месяца, кроме диопсида содержит кварц, маргарит $\text{Ca}_{0,88}\text{Na}_{0,12}\text{Al}_2(\text{Si}_{2,12}\text{Al}_{1,88}\text{O}_{10})(\text{OH})_2$, альбит $\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$, иллит $\text{K}(\text{Al}_4\text{Si}_2\text{O}_9(\text{OH})_3)$. В составе шлака НЗФ кроме диопсида обнаружен минерал – титанит $\text{Ca}(\text{Ti}_{0,818}\text{Al}_{0,182})(\text{O}_{0,818}\text{F}_{0,182})(\text{SiO}_4)$. Основными минералами шлака «АрселорМиттал» являются ранкинит $\text{Ca}_3\text{Si}_2\text{O}_7$, окерманит $\text{Ca}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$ и геленит $\text{Ca}_2\text{Al}(\text{Al},\text{Si})_2\text{O}_7$.

Элементные составы гранулометрических фракций шлака ПФНК практически идентичны друг другу и составу шлака НЗФ производства сплава FeSi. В последнем случае наблюдаются различия по повышенному содержанию S, Mn и F. Шлаки НЗФ производства сплавов FeMn и SiMn имеют существенно другой состав. Преобладание карбидов Fe и Mn (сплав FeMn) и сульфида Fe (сплав SiMn), наличие Fe, Mn, Pb, S, P, Sb и Sr, практическое отсутствие стеклофазы приводит к тому, что данные шлаки невозможно рассматривать как перспективные шлаковые сорбенты. Доказано, что шлак ПФНК на 53 % состоит из диопсида в аморфном состоянии, что повышает сорбционную активность шлака за счет поверхностного поглощения сорбатов аморфной фазой [1].

Сравнение элементного состава гранулированного (фракция > 10 мм) и отвального доменного шлака «АрселорМиттал» показывает, что в отвальном шлаке меньше Ca, но присутствуют Fe и Mn. Анализ оксидного состава фракции > 10 мм гранулированного шлака показал высокое содержание алюмосиликатов кальция и магния.

Гамма-спектрометрическим методом определены удельные активности радионуклидов (C_i) и эффективные удельные активности ($C_{\text{эф}}$) шлаков, которые не превышают 370 Бк/кг, что соответствует I классу радиационной опасности [1]. Таким образом, шлаки могут использоваться в качестве технических материалов: строительных материалов и сорбентов.

Структура поверхности шлаковых частиц. С помощью растровой электронной микроскопии доказано присутствие стеклофазы и редих пор на поверхности образцов шлаков ПФНК и шлака НЗФ производства FeSi (рис. 1). Поверхность отвального шлака «АрселорМиттал» более разрыхленная по сравнению с гранулированным (рис. 1). Разная величина кристаллитов и их морфология определяют напряжение в шлаковом стекле и влияют на сорбционную активность фракции. На микрофотографиях видна структурообразующая пористость. Согласно состоянию поверхностного слоя все изученные шлаки являются хорошими адсорбентами, которые обладают многочисленными микроскопическими выступами и углублениями [1].

Сорбционные свойства шлаков. Основными критериями эффективного использования шлаков в качестве сорбентов являются: отсутствие токсичных элементов, наличие алюмосиликатов кальция и магния, аморфного состояния веществ, пористой или слоистой структуры шлаков, отсутствие вымывания компонентов шлаков в раствор и десорбции сорбатов, соответствие нормам радиационной безопасности.

Пористость частиц шлака ПФНК составляет 46,7 %, большая часть пор замкнутая, открытая пористость составляет 3 %. Поэтому адсорбция ароматических соединений протекает не в порах, а на открытой поверхности

шлака, что характерно для порошкообразных адсорбентов. Повышение эффективности процесса сорбции возможно при разрыхлении и увеличении площади поверхности сорбентов. Подобный эффект достигается измельчением шлаков и химической активацией поверхности частиц растворами кислот или щелочей.

Величину адсорбции шлаков (a) определяли по формуле:

$$a = \frac{(C_1 - C_2) \cdot V}{m}, \text{ мг / г,}$$

где C_1 и C_2 – соответственно концентрации сорбата до и после сорбции, мг/дм³;

V – объем раствора, дм³;

m – масса сорбента, г.

Показано, что наиболее эффективная кислотная активация шлака ПФНК при обработке шлака в 0,5 М растворе сульфатной кислоты при температуре 20 °С, при которой достигается максимальное травление и разрыхления поверхности частиц. Повышение концентрации кислоты вызывает излишний расход реактива, а уменьшение – снижает емкость шлака. Расчет оксидного состава шлаков показал выщелачивание из шлака соединений алюминия, кремния и магния. Щелочная активация вызывает растворение кремнезема. Разработан способ получения адсорбента на основе металлургического шлака за счет химической активации поверхности шлаковых частиц [2].

Для шлака НЗФ величина адсорбции кислотно-активированного шлака составляет 97 % от максимума при эффективности очистки раствора 92 %, что вполне достаточно для извлечения органических соединений из сточных вод. Предел сорбции шлаком «АрселорМиттал» практически не зависит от вида химической активации, в связи с этим рекомендована обработка шлака водой. Эффективность извлечения сорбата 97 % [1].

Практическое использование шлаковых сорбентов разрешается при отсутствии вымывания из них собственных компонентов и поглощенных сорбатов. Подщелачивание воды после выдержки шлака на протяжении 1 мес. объясняется гидролизом силикатионов. Превышение норм по катионам

(K^+ , Na^+ , Mg^{2+} , Sr^{2+} , Ca^{2+} , Ba^{2+}) и анионам (Cl^- , SO_4^{2-} , NO_3^- , SiO_3^{2-}) не наблюдается, кроме катиона Ba^{2+} , после выдержки шлака НЗФ. Следовательно, данный шлак нельзя рекомендовать в качестве сорбента для очистки питьевых вод, но возможно его использование для обработки сточных вод при условии замкнутого цикла водопотребления. Доказано отсутствие десорбции поглощенных сорбатов из поверхности шлаков.

Поверхностные функциональные группы шлаков. Методом ИК-спектрофотометрии показано, что химическая активация изменяет природу и количество функциональных групп шлака. При спекании шлака протекает термическое дегидроксигирование. Исходный шлак характеризуется полосами поглощения силоксановой ($\equiv Si-O-Si \equiv$), силанольной ($\equiv Si-OH$) групп и молекул воды. Наличие аморфных веществ и сильное напряжение силоксановых связей

способствуют протеканию при кислотной активации регидроксигирования с повышением интенсивности пика поглощения силанольных групп.

Диссоциация силанольных групп определяет негативный заряд поверхности шлаковых частиц. Методом макроэлектрофореза взвесей шлаков определены электрокинетические потенциалы шлаковых частиц (ξ) (таблица 1).

Кинетические характеристики и механизм адсорбции органических соединений шлаковыми сорбентами.

Адсорбция органических красителей. Расчетно-графическим методом определена смена порядка процесса адсорбции МС шлаками: в начальный период процесса реализуется второй порядок адсорбции при электростатическом взаимодействии функциональных групп сорбента и ионов сорбата, после выяснения всех функциональных групп протекает межмолекулярное вза-

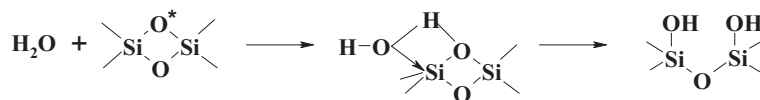


Табл.1.

Электрокинетические потенциалы шлаковых частиц

Шлак металлургического комбината	ξ , мВ
ПФНК	22,2
НЗФ	15,1
«АрселорМиттал Кривой Рог»	11,7

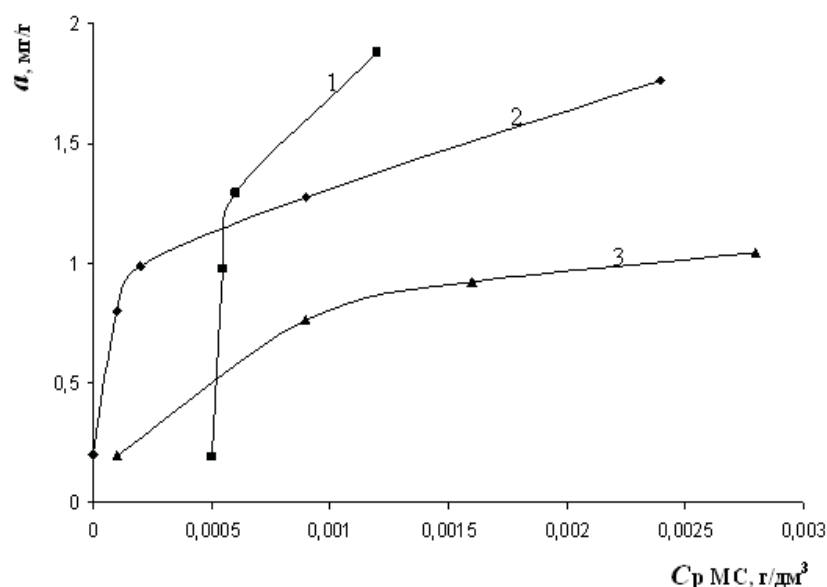


Рис. 2. Изотермы адсорбции МС сорбентами на основе металлургических шлаков предприятий: 1 – НЗФ; 2 – «АрселорМиттал Кривой Рог»; 3 – ПФНК

Табл.2.

Уравнение Фрейндлиха и Ленгмюра адсорбции МС шлаковыми сорбентами

Шлаковый сорбент	ПФНК	НЗФ	«АрселорМиттал»
Уравнения Фрейндлиха	$a = 3,72 \cdot C_p^{0,58}$	$a = 31,6 \cdot C_p^{0,68}$	$a = 10,5 \cdot C_p^{0,61}$
Уравнения Ленгмюра	$A = 3,8 \cdot 10^{-3} \frac{6,54 \cdot 10^5 C}{6,54 \cdot 10^5 C + 1}$, ммоль/г	$A = 1,6 \cdot 10^{-2} \frac{1,5 \cdot 10^5 C}{1,5 \cdot 10^5 C + 1}$, ммоль/г	$A = 10^{-2} \frac{2,2 \cdot 10^5 C}{2,2 \cdot 10^5 C + 1}$, ммоль/г
$-\Delta G$, кДж/моль	33	29	30

имеет действие на свободной поверхности шлака (первый порядок процесса). Чем больше соотношение «сорбат : шлак», тем раньше во времени происходит смена порядка реакции. Определены константы скорости реакции и периоды полунасыщения ($\tau_{1/2}$) для процессов разных порядков, которые составляют для шлаков, сут.: ПФНК – $\tau_{1/2(2)} = 4,31$; $\tau_{1/2(1)} = 49,5$; НЗФ – $\tau_{1/2(2)} = 1,35$; $\tau_{1/2(1)} = 9,6$; «АрселорМиттал» – $\tau_{1/2(1)} = 6,6$.

Отсутствие ступенчатого характера изотерм адсорбции говорит о наличии адсорбционных центров с одинаковой активностью (рис. 2). Выпуклая форма изотерм свидетельствует о протекании адсорбции по одному механизму с образованием мономолекулярного слоя сорбата. В интервале низких концентраций сорбата МС адсорбция шлаковыми частицами опи-

сывается уравнением Фрейндлиха, по всей концентрационной области – уравнением Ленгмюра (таблица 2). Согласно величинам констант адсорбции K рассчитаны изобарно-изотермические потенциалы адсорбции.

Адсорбция низкомолекулярных ароматических соединений шлаком ПФНК обусловлена образованием водородных связей π -электронов бензольного кольца с поверхностными силанольными группами. Эффективность адсорбции возрастает в ряду: n -нитрофенол < фенол < анилин < n -нитроанилин. Менее выражена адсорбция n -нитрофенола по сравнению с фенолом, связана с уменьшением отрицательного заряда на атоме кислорода и ослаблением водородной связи между фенольной группой и ОН-группами поверхности шлака.

Адсорбция ароматических со-

единений шлаком ПФНК описывается уравнениями Ленгмюра: для

$$n\text{-нитроанилина } A = A_{\text{пред}} \frac{KC}{KC + 1} = 1,8 \cdot 10^{-3} \frac{2,8 \cdot 10^5 C}{2,8 \cdot 10^5 C + 1}, \text{ ммоль/г, при } \Delta G$$

$$= -31 \text{ кДж/моль; для } n\text{-нитрофенола}$$

$$A = 2,7 \cdot 10^{-3} \frac{4,5 \cdot 10^4 C}{4,5 \cdot 10^4 C + 1}, \text{ ммоль/г, при}$$

$$\Delta G = -26,5 \text{ кДж/моль.}$$

Расчет доли неионизированных молекул показал, что увеличение эффективности адсорбции слабых ароматических электролитов на шлаках связано с уменьшением способности электролитов к диссоциации. Вклад дисперсионного взаимодействия n -нитроанилина с поверхностью шлака оценили сравнением $-\Delta G_{\text{экср}} = 31$ кДж/моль с расчетным значением $-\Delta G$ по сумме инкрементов $\delta(-\Delta G)$ отдельных структурных звеньев молекулы и ее функциональной

группы 24,8 кДж/моль. По соотношениям

$$\frac{\sum \delta(-\Delta G)}{-\Delta G_{\text{экср}}} = 0,8 \text{ вклад дисперсионного}$$

взаимодействия в адсорбцию составляет 80 %. Реализация дисперсионного взаимодействия неионизированных молекул слабых электролитов с поверхностью шлаков имеет практическое значение при глубокой очистке вод [1].

Адсорбция ПАВ. Доказано эффективность протекания адсорбции АПАВ и КПАВ шлаком на основе минерала диопсида в статическом и динамическом режимах процесса в широком концентрационном интервале. Впервые экспериментально подтверждена адсорбция АПАВ шлаковым сорбентом кислотного характе-

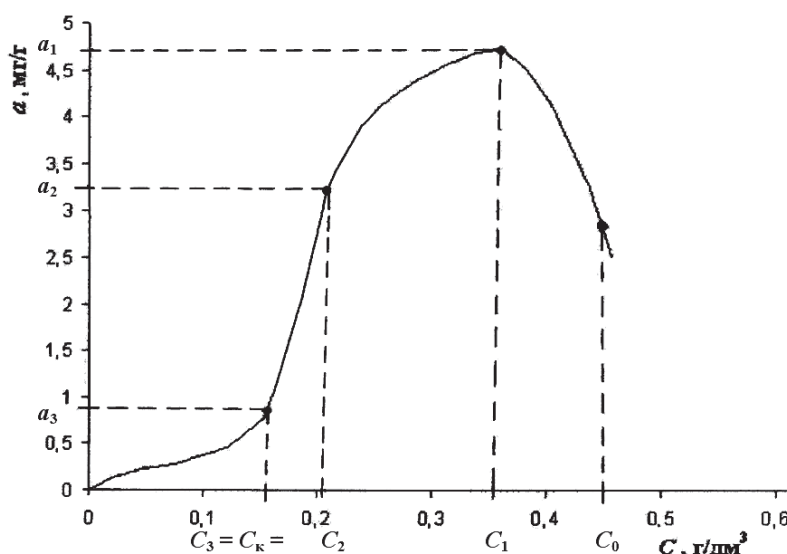


Рис. 3. Изотерма адсорбции додецилсульфоната натрия с рабочими концентрациями, координаты которых используются для проведения противоточно-ступенчатой адсорбционной очистки вод

ра. Показано, что ПАВ образуют полимолекулярный слой ассоциатов на поверхности шлаковых частиц при адсорбции из растворов с концентрацией сорбата ниже критической концентрации мицеллообразования (ККМ) с числом молекул АПАВ в объемном ассоциате, который адсорбируется, $n_p = 26$, фактором ассоциации молекул $C_{12}H_{25}OSO_3Na$ на поверхности шлакового адсорбента $f_{ass} = 743$, константой ассоциации $K_{ass} = 10^5$, чему отвечает $\Delta G_{ass} = -28,5$ кДж/моль. Изотерма адсорбции АПАВ приведена на рис. 3.

Влияние кислотности на эффективность адсорбции шлаковыми сорбентами. Кислотность растворов влияет на эффективность адсорбции МС. В кислой среде на поверхности шлака образуется гелеобразный слой кремниевой кислоты с высокими сорбционными свойствами. В интервале рН 4,8-10,4 эффективность извлечения МС достигает 97 % при величине адсорбции 93 % от предельной. В очень кислых растворах уменьшается диссоциация силанольных групп, отрицательный заряд поверхности шлака и поглощения органических катионов. При рН > 10 разрушается гелеобразный силикатный слой [1].

Определена зависимость вида химической активации шлака на основе диоксида от режима адсорбции органических красителей на примере МВ: кислотная активация шлака целесообразна при статическом режиме адсорбции; щелочная – в условиях динамической адсорбции.

Математическое описание процесса адсорбции шлаками создано при помощи пакета прикладных программ MATLAB и его подсистемы Toolbox. Для прогнозирования протекания адсорбции в реальных промышленных условиях получены уравнения регрессии второго и третьего порядка зависимости величины и эффективности адсорбции от экспериментальных факторов: времени процесса, кислотности жидкой фазы, отношения «сорбат : шлаковый сорбент» [3].

Разработка технологических схем адсорбционной очистки сточных вод с применением шлаковых сорбентов. Для очистки сточных вод от ПАВ на примере додецилсульфоната натрия на уровне высоких концентраций раз-

работана рациональная противоточная ступенчатая адсорбционная схема перидического действия [4]. При встречном движении очищаемой воды и шлакового сорбента в каскаде из трех адсорберов с отстойниками доза адсорбента полностью насыщается ПАВ. Свежая порция шлака поступает только в конечный адсорбер. На изотерме адсорбции (рис. 3) указаны концентрации для ступеней каскада: C_0 – начальная, $C_k = \text{ККМ}$ – конечная, а также соответствующие величины адсорбции a сорбента, согласно которым масса адсорбента одинаковая для всех ступеней каскада. Время контакта шлака с очищаемым раствором 2-3 часа при потоке жидкости через адсорбер-смеситель 1,7-2,5 м³/час. Преимуществом способа является высокая экономико-экологическая эффективность, уменьшение расхода сорбента по сравнению с перекрестно-ступенчатой схемой очистки, возможность очистки

сточных вод от ПАВ на уровне высоких концентраций, применение способа возможно и при адсорбции КПАВ.

Предложен способ перекрестно-ступенчатой адсорбционной очистки сточных вод [5] от органических загрязнителей с обеспечением замкнутости цикла оборотного водопотребления (рис. 4). Отвальный металлургический шлак из отвала попадает в блок подготовки и активации шлакового адсорбента (А) изначально на измельчение, затем – на кислотную активацию, после которой шлаковый сорбент направляют в адсорберы блока адсорбционной очистки сточных вод (Б). После окончания цикла в каждом адсорбере очищенная вода перекачивается в следующий адсорбер. Суспензия оставшегося шлака попадает на разделение в блок (В), который состоит из трех отстойников. Очищенные воды сливаются вместе и попадают на исходное предприятие в технологиче-

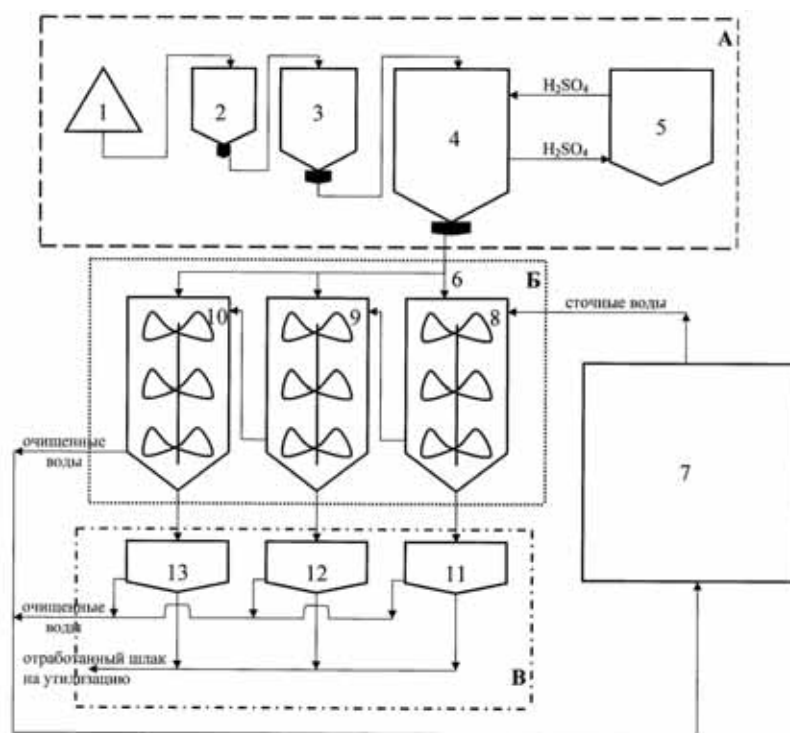


Рис. 4. Схема перекрестно-ступенчатой адсорбционной очистки сточных вод от органических загрязнителей:

А – блок подготовки и активации шлакового сорбента:

1 – отвал металлургического шлака; 2 – конусная дробилка; 3 – валковая дробилка; 4 – резервуар для активации шлака; 5 – резервуар с раствором H_2SO_4 ; 6 – дозатор; 7 – предприятие, в технологическом процессе которого образуются сточные воды

Б – блок адсорбционной очистки сточных вод: 8, 9, 10 – каскад адсорберов с принудительным перемешиванием пропеллерными мешалками

В – блок разделения суспензии: 11, 12, 13 – отстойники

ский цикл. Цикл оборотного водопотребления замкнулся. Годовой экономический эффект составляет 45721 грн. при экономии на расходе воды 67,9 % при объеме воды 30 м³, ежедневно образующихся на небольшом текстильном предприятии.

Выводы.

1. Определены условия адсорбции металлургическим шлаком на основе минерала диоксида органических красителей, ароматических соединений и ПАВ в отсутствие десорбции поглощенных сорбатов. Оптимизирован режим кислотной активации шлаков. Установлена корреляция между природой активизирующего агента и факторами, повышающими эффективность сорбционной очистки вод: числом адсорбционных центров – OH и Si–OH, зарядом поверхности шлаковых частиц и образованием аморфных соединений. Оптимизирован интервал pH жидкой фазы для повышения эффективности адсорбции.

2. Доказано, что для большинства изученных органических соединений мономолекулярная адсорбция шлаками имеет физическую природу. Смена порядка процесса сорбции во времени связана с реализацией двух механизмов: электростатического взаимодействия диссоциированных функциональных групп адсорбента и ионов сорбата (второй порядок процесса), после полного связывания функциональных групп протекания ван-дер-ваальсовской адсорбции (первый порядок). Впервые подтверждена адсорбция АПАВ шлаковым сорбентом кислотного характера.

3. Выведены уравнения, количественно описывающие адсорбцию: уравнения Фрейндлиха в области низких концентраций сорбатов и уравнения Ленгмюра – по всей концентрационной области растворов сорбатов. Для прогнозирования эффективности адсорбционной очистки вод шлаковыми сорбентами в производственных условиях разработана методика расчета показателей процесса в широких интервалах его параметров, основанная на достоверных уравнениях регрессии.

4. Разработаны способы перекрестно-ступенчатой и противоточно-ступенчатой адсорбционной очистки сточных вод от органических загрязнителей шлаковым сорбентом на основе минерала диоксида. Экономический эффект

при внедрении технологии адсорбционной очистки сточных вод с обеспечением замкнутости цикла оборотного водопотребления составляет 45721 грн/год при экономии на расходе воды 67,9 % при суточном образовании на предприятии 30 м³ сточных вод.

References:

1. Obespechenie ekologicheskoi bezopasnosti pri ispol'zovanii metallurgicheskikh shlakov v kachestve sorbentov v tekhnologiyakh ochistki vod: monografiya [Ensuring the environmental safety in the use of metallurgical slags as sorbents in water purification technologies: monograph]., E.B. Khobotova, I.V. Graivoronskaya. – Khar'kov., KhNADU, 2013. – 204 p.

2. Pat. UA 65734, MPK V01J 20/10 (2006.01). Sposib otrimannya sorbentu na osnovi metalurginogo sh laku [A method for producing sorbent based on metallurgical slag]., E.B. Khobotova, I.V. Graivorons'ka, V.V. Datsenko; vlasnik Khark. nats. avtomob.-dor. un-t. [owner Kharkov National Automobile Road University]. – No. U 2011 07071; zayavl. 06.06.2011; opubl. 12.12.2011, Byul. No. 23.

3. Khobotova E.B., Graivoronskaya I.V., Kolodyazhnyi V.M., Lisin D.A., Mekhtiev K.S. Raschet pokazatelei adsorbtsii sh lakovym sorbentom. Ekologiya i promyshlennost'. [Calculation of indexes of adsorption by the slag sorbent. Ecology and industry]. – 2013., No. 1., pp. 57-60.

4. Pat. UA 85328, MPK V01D 15/02 (2006.01). Sposib protitochno-stupinchatoï adsorbtsiinoï ochistki stichnikh vod vid poverkhevo-aktivnikh rechovin v oblasti visokikh kontsentratsii [Method of step-and-countercurrent adsorption in the waste water filtering from surfactants in high concentrations]., E.B. Khobotova, I.V. Graivorons'ka, V.I. Larin; vlasnik Khark. nats. avtomob.-dor. un-t. [owner Kharkov National Automobile Road University]. – No. U 2013 08284; zayavl. 01.07.2013; published. 11.11.2013, Bullitin. No. 21.

5. Pat. UA 82360, MPK V01D 15/02 (2006.01). Sposib stupinchatoï adsorbtsiinoï ochistki stichnikh vod sh lakovim sorbentom iz zabezpechenniam zamknosti tsiklu oborotnogo vodospozhivannya [Method of step adsorption of wastewater treatment using the slag sorbent providing closed

water filtering cycle]., E.B. Khobotova, I.V. Graivorons'ka; vlasnik Khark. nats. avtomob.-dor. un-t. [owner Kharkov National Automobile Road University]. – No. U 2013 02735; zayavl. 04.03.2013; published. 25.07.2013, Bullitin No. 14.

Литература:

1. Обеспечение экологической безопасности при использовании металлургических шлаков в качестве сорбентов в технологиях очистки вод: монография / Э.Б. Хоботова, И.В. Грайворонская. – Харьков: ХНАДУ, 2013. – 204 с.

2. Пат. UA 65734, МПК В01J 20/10 (2006.01). Спосіб отримання сорбенту на основі металургійного шлаку / Е.Б. Хоботова, І.В. Грайворонська, В.В. Даценко; власник Харк. нац. автомоб.-дор. ун-т. – № U 2011 07071; заявл. 06.06.2011; опубл. 12.12.2011, Бюл. № 23.

3. Хоботова Э.Б., Грайворонская И.В., Колодяжный В.М., Лисин Д.А., Мехтиев К.С. Расчет показателей адсорбции шлаковым сорбентом // Экология и промышленность. – 2013. – № 1. – С. 57-60.

4. Пат. UA 85328, МПК В01D 15/02 (2006.01). Спосіб протиточно-ступінчатої адсорбційної очистки стічних вод від поверхнево-активних речовин в області високих концентрацій / Е.Б. Хоботова, І.В. Грайворонська, В.І. Ларін; власник Харк. нац. автомоб.-дор. ун-т. – № U 2013 08284; заявл. 01.07.2013; опубл. 11.11.2013, Бюл. № 21.

5. Пат. UA 82360, МПК В01D 15/02 (2006.01). Спосіб ступінчатої адсорбційної очистки стічних вод шлаковим сорбентом із забезпеченням замкненості циклу оборотного водоспоживання / Е.Б. Хоботова, І.В. Грайворонська; власник Харк. нац. автомоб.-дор. ун-т. – № U 2013 02735; заявл. 04.03.2013; опубл. 25.07.2013, Бюл. № 14.

Information about authors:

1. Elina Khobotova - Doctor of Chemistry, Full Professor, Kharkiv National Automobile and Highway University; address: Ukraine, Kharkiv city; e-mail: chemistry@khadi.kharkov.ua

2. Inna Grayvoronskaya - Postgraduate Student, Kharkiv National Automobile and Highway University; address: Ukraine, Kharkiv city; e-mail: chemistry@khadi.kharkov.ua

QUANTITATIVE CHARACTERISTICS OF THE REACTION ENVIRONMENT

G. Simonian, Candidate of Chemistry, Associate Professor
Yerevan State University, Armenia

The parameters characterizing solvents, obtained by the kinetic, spectroscopic or thermodynamic methods are discussed. The comparison of parameters, obtained using different methods, shows that there is a linear dependence among some of them. It means that parameters obtained using different methods for different reaction series, reflect changes of the same micro-properties of the environment in terms of replacement of one solvent by another. A new parameter of the solvent nucleophilicity (U) is offered.

Keywords: parameters of solvents, electrophilicity, nucleophilicity, Simonian's parameter – U.

Conference participants, National championship in scientific analytics,
Open European and Asian research analytics championship


КОЛИЧЕСТВЕННАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РЕАКЦИОННОЙ СРЕДЫ

Симонян Г.С., канд. хим. наук, доцент
Ереванский государственный университет, Армения

Обсуждаются параметры, характеризующие растворители, полученные кинетическими, спектроскопическими или термодинамическими методами. Сравнение параметров, полученные разными методами, показывает, что между некоторыми из них существует линейная зависимость, которая говорит о том, что параметры, полученные разными методами и для разных реакционных серий, отражают изменения тех же микросвойств среды при замене одного растворителя другим. Предложен новый параметр нуклеофильности растворителя – U.

Ключевые слова: параметры растворителя, электрофильность, нуклеофильность, параметр Симоняна – U.

Участники конференции, Национального первенства по научной аналитике,
Открытого Европейско-Азиатского первенства по научной аналитике

 <http://dx.doi.org/10.18007/gisap:pmc.v0i5.1041>

Одним из направлений в кинетике жидкофазных реакций является создание различных эмпирических и полумпирических корреляционных уравнений, связывающих кинетические или термодинамические параметры жидкофазных процессов со свойствами среды. Появление такого направления вполне закономерно, так как наличие всевозможных химических взаимодействий между растворенным веществом и средой (образование водородных связей, комплексов с переносом заряда p-комплексов, координационных комплексов и др.) иногда нивелирует влияние полярности (диэлектрической проницаемости и показателя преломления среды на кинетику реакций или на изменение физико-химических свойств растворенного вещества [1].

Здесь будут рассмотрены основные параметры, описывающие зависимость реакционной способности от растворителя, которые с большей или меньшей степенью используются при количественном рассмотрении органических реакций в растворах. Все параметры, характеризующие растворители, получены кинетическими, спектроскопическими или термодинамическими методами.

1. Параметры растворителя, полученные кинетическими методами.

Первой работой по созданию корреляционных уравнений, относящихся к влиянию растворителя, является исследование Грюнвальда и Уинстейна [2], посвященное кинетике и механизму сольволиза алкил- и арилгалогенидов в различных средах.

“Ионизирующей силой” растворителя (Y) предложено называть разницу логарифмов констант скорости сольволиза хлористого трет-бутила при 25°C в данном растворителе и стандартной среды (80% C₂H₅OH);

$$\lg k = \lg k_0 + mY.$$

Значение Y лежит в пределах от -3 до 4.

Величине Y авторы придали смысл суммарной “ионизирующей силы” растворителя, что обусловлено как его диэлектрическим свойством, так и способностью к образованию водородных связей типа R – Cl.....HOR.

Другой чисто эмпирической мерой “полярности” растворителя является параметр W, предложенный Берсоном, Хамилетом и сотр. [3], изучившими кинетику присоединения цикlopentadiена к метилакрилату в различных растворителях (реакция Дильс–Альдера). В ходе этой реакции образуется в различных соотношениях эндо- и экзо-изомеры продуктов присоединения, причем соотношение этих изомеров существенно зависит от природы растворителя;

$$\Omega = \lg[\text{эндо-изомер}] - \lg[\text{экзо-изомер}].$$

Параметры Ω были успешно использованы [3] для нахождения корреляции данных о сольволизе некоторых арилсульфонатов и данных о перегруппировке бензоилазидов в различных средах с природой растворителя.

2. Параметры растворителя, полученные спектроскопическими методами.

а) УФ спектроскопические параметры. Косовером [4] была предложена эмпирическая мера полярности растворителей, основанная на количественной оценке их влияния на электронные спектры поглощения 1-этил-4-карбометоксипиридиний йодида. Показано, что положение максимума полосы переноса заряда этого соединения сильно зависит от химической природы и состава растворителя. Длины волн максимумов поглощения в ряду растворителей были перечислены в энергии электронного перехода – Z (ккал/моль). При исследовании спектров поглощений углеводородных растворителей трудность представляет собой ограниченная растворимость в них исследуемого вещества, поэтому для определения Z в углеводородах в качестве стандартного вещества была взята N-окись пиперидина [4].

Надо отметить, что при сопоставлении Z и Ω для различных растворителей оказалось, что между ними существует строгая корреляция с $r = 0,971$.

Предложенный Димротом и Райхардом [5,6] параметр E_T , который ничем не отличается от параметра Z, но для соединения 4-(2,4,6-трифенилпиридино)-2,6-дифенилфенолат (бетаин). В литературе принято также обозначение E_T (30);

$$E_T = v_{\text{макс}} \cdot 2,859 \cdot 10^{-3} \approx Z \text{ (ккал/моль)}.$$

Табл. 1.

Константа скорости реакции АН-МФ(к) и параметры растворителя

Растворитель	E_t [5]	B[10]	AN[12]	k[14]	U	DN[13]
H ₂ O	63,1	123	54,8	$3,0 \times 10^{-2}$	3,824	18,0
ФА	56,6	155	39,8	$3,2 \times 10^{-3}$	2,852	-
CH ₃ OH	55,5	-	41,5	$3,1 \times 10^{-3}$	2,838	19,0
C ₂ H ₅ OH	51,9	-	37,9	$1,0 \times 10^{-3}$	2,346	18,5
C ₄ H ₉ OH	50,2	160	36,8	$4,2 \times 10^{-4}$	1,970	18,0
Ацетонитрил	46,0	101	18,9	$1,4 \times 10^{-4}$	1,493	14,1
ДМСО	45,0	195	19,3	$1,1 \times 10^{-4}$	1,387	29,8
ДМФ	43,8	159	16,0	$8,5 \times 10^{-5}$	1,276	26,6
1,4-диоксан	36,0	129	10,8	$1,0 \times 10^{-5}$	0,305	14,8
Бензол	34,5	52	8,2	$4,5 \times 10^{-6}$	0	0,1

Шкалу E_t используют также в следующем виде:

$$E_t^N = E_t(\text{раств.}) - E_t(\text{ТМС}) / \\ E_t(\text{H}_2\text{O}) - E_t(\text{ТМС}) = \\ = E_t(\text{раств.}) - 30,7/32,4$$

Используя $E_t = 30,7$ для тетраметилсилана (ТМС) и $E_t = 63,1$ для воды, получаем $E_t^N = 0$ для ТМС и $E_t^N = 1,0$ для воды. В отличие от Z значения E_t определены для большого числа растворителей (свыше 360). Корреляция кинетических данных некоторых реакций с параметром E_t растворителей вполне удовлетворительная.

Исходя из спектров поглощения сольватохромных соединений в УФ и видимом диапазоне, с помощью метода сольватохромного сравнения, Камлет и Тафт предложили параметры α и β [7,8], где β — характеризует основность растворителей как акцепторы водородной связи, а α — кислотности растворителей как доноры водородной связи. β — разница сдвигов DDn в спектрах 4-нитроанилина относительно N,N-диэтил-4-нитроанилина, α — это разница сдвигов 4-нитроанизола относительно бетаинового красителя. Ими предложен также параметр π^* (электронный переход $\pi \rightarrow \pi^*$). Для создания шкалы параметров ρ^* использованы эффекты растворителей на отношение величин ρ различных нитроароматических соединений (напр., 4-нитроанизол, N-метил-2-нитро-п-толуидин и т.д.).

б) ИК спектроскопические параметры. В литературе по колебательным спектрам молекул имеется значительное число работ, посвященных корреляциям между частотами валентных

колебаний карбоксильной группы кетонов и свойствами растворителя [9]. Эти работы послужили основанием для создания еще одной корреляционной шкалы, в основу которой положены результаты исследований влияния растворителя на положение частоты поглощений группы C=O ДМФ, бензофенона, ацетона, S=O ДМСО.

Данные по ИК-спектрам дейтерометанола CH₃OD были использованы Коппелем и Пальмом для построения шкалы нуклеофильной способности растворителей [10]. В качестве меры нуклеофильной способности среды принята величина;

$$B = n_{\text{OD}}^0 - n_{\text{OD}}$$

где n_{OD}^0 и n_{OD} — частоты валентных колебаний связи OD в CH₃OD, газовой фазе и данном растворителе.

Пальмом [10] для характеристики нуклеофильной способности растворителя использован также сдвиг ИК-частоты OH-группы в молекуле фенола;

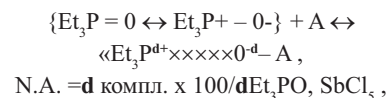
$$B_{\text{PhOH}} = n_{\text{PhOH}}^0 - n_{\text{PhOH}}$$

где n_{PhOH}^0 и n_{PhOH} — частоты валентных колебаний OH-группы свободного и связанного с растворителем фенола в среде CCl₄. В и B_{PhOH} хорошо коррелируют между собой ($r=0,9708$).

в) ЯМР-спектроскопические параметры. Под влиянием растворителя происходит также сдвиг в спектрах ЯМР. Например, химические сдвиги ^{19}F , ^{13}C , ^{17}O , ^{31}P , ^{119}Sn .

С помощью измерения химического сдвига ^{31}P в молекуле окси-триметилфосфина при комплексообразовании, где фосфин выступает

как донор, а в роли акцептора — растворитель, Майером и Гутманом предложен новый параметр растворителя — акцепторное число NA [11,12];



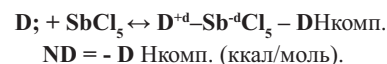
где SbCl₅ является эталонным растворителем.

Получается удовлетворительная корреляция между NA и $d^{13}\text{C}$ и $d^{17}\text{O}$:

$$\text{NA} = (13,46554 \pm 5,7536) + \\ (6,22967 \pm 1,04918)d^{13}\text{C}, r=0,94768, \\ \text{NA} = (14,03062 \pm 5,62962) - \\ (1,48449 \pm 0,24715)d^{17}\text{O}, r=0,94878.$$

3. Параметры, полученные термодинамическими методами.

В работе [13] при исследовании калориметрическим методом энтальпии комплексообразования SbCl₅ (кислота Льюиса) с растворителями в 1,2-дихлорэтаноле (эталонный растворитель) при T = 293 K Маркусом предложен новый параметр растворителя — донорное число ND;



Для стандартизации шкалы ND, донорные числа растворителей разделяют на ND гексаметилфосфотриамида (38,8 ккал/моль); $\text{ND}^N = \text{ND} / 38,8$ ккал/моль.

Для характеристики электрофильности растворителей нами предлагается очень простой и доступный параметр — U:

$$U = \lg(k_s/k_o) = \lg k_s - \lg k_o,$$

Где k_s и k_o — константы скоростей реакции акрилонитрила с морфолином при 293K, соответственно в растворителе S и в бензоле [14]. Значение U лежит в интервале 0 (для бензола) и 3,82238 (для воды).

Сравнение параметров, характеризующих растворители, полученных разными методами, пока зывает, что между некоторыми из них существует линейная зависимость. Так, Et, который характеризует электро-

фильность растворителя, коррелирует с Z, NA, Ω;

$$E_T = (-0,385 \pm 1,841) + (0,647 \pm 0,026)Z, r=0,9779,$$

$$E_T = (33,228 \pm 0,985) + (0,573 \pm 0,038)NA, r=0,9741,$$

$$E_T = (9,438 \pm 4,038) + (53,871 \pm 5,938)\Omega, r=0,9547.$$

Параметр В, который характеризует нуклеофильность растворителя, хорошо коррелирует с ND;

$$B = (42,733 \pm 6,169) + (4,845 \pm 0,273)DN, r = 0,9829.$$

Следует отметить, что получается хорошая корреляция между параметром Симоньяна-U и другими параметрами электрофильности растворителей

$$U = (-4,78 \pm 0,30) + (0,139 \pm 0,006)E_T, r = 0,974$$

$$U = (-5,24 \pm 0,33) + (0,094 \pm 0,004)Z, r = 0,987$$

$$U = (-0,24 \pm 0,21) + (0,073 \pm 0,006)NA, r = 0,970$$

Данные корреляции говорят о том, что параметры, полученные разными методами и для разных реакционных серий, отражают изменения тех же микросвойств среды при замене одного растворителя другим.

Литература:

1. Raikhard K. Rastvoriteli i efekty sredy v organicheskoi khimii [Solvents and effects of the environment in organic chemistry]. - Moscow., Mir [World], 1991. - 763 p.

2. Grunwald E., Winstein S. The Correlation of Solvolysis Rates., Journal of the American Chemical Society., 1948, Vol. 70, No. 2, pp. 846-850.

<http://dx.doi.org/10.1021/ja01182a117>

3. Berson J.A., Hamlet Z., Mueller W.A. The Correlation of Solvent Effects on the Stereoselectivities of Diels-Alder Reactions by Means of Linear Free Energy Relationships. A New Empirical Measure of Solvent Polarity., Journal of the American Chemical Society., Vol. 84, No. 2, pp. 297-304.

<http://dx.doi.org/10.1021/ja00861a033>

4. Kosower E.N. The Effect of Solvent on Spectra. I. A New Empirical Measure of Solvent Polarity: Z-Values., Journal of the American Chemical Society., 1958, Vol. 80, No. 13, pp. 3253-3260.

<http://dx.doi.org/10.1021/ja01546a020>

5. Dimroth K., Reichardt C., Siepmann T., Bohlmann E. Uber Pyridinium-N-phenol-betaine und ihre Verwendung Zur Charakterisierung der Polarität von Lösungsmitteln., Justus Liebig's Annalen der Chemie., 1963, B. 661, pp. 1-37.

6. Dimroth K., Reichardt C. Erweiterung der Lösungsmittelpolaritätsskala durch Verwendung Alkyl-substituierter Pyridinium-N-phenol-betaine., Justus Liebig's Annalen der Chemie., 1969, B. 727, pp. 93-105.

7. Kamlet M.J., Abbott J.I., Taft R.W. The solvatochromic comparison method. 6. The π^* scale of solvent polarities., Journal of the American Chemical Society., 1977, Vol. 99, No. 18, pp. 6027-6038.

<http://dx.doi.org/10.1021/ja00460a031>

8. Kamlet M.J., Abbott J.I., Abraham M.H., Taft R.W. Linear solvation energy relationships. 23. A comprehensive collection of the solvatochromic parameters, π^* , α and β , and some methods for simplifying the generalized solvatochromic equation., The Journal of Organic Chemistry., 1993, Vol. 48, No. 17, pp. 2877-2887.

<http://dx.doi.org/10.1021/jo00165a018>

9. Bellamy L.J. Solvent effect on infrared group frequencies., Spectrochimica Acta, 1959, Vol. 14, pp. 192-197.

[http://dx.doi.org/10.1016/0371-1951\(59\)80228-9](http://dx.doi.org/10.1016/0371-1951(59)80228-9)

10. Pal'm V.A. Osnovy kolichestvennoj teorii organicheskikh reakcij [Fundamentals of the quantitative theory of organic reactions]. - Leningrad., Chemistry., 1977, p. 88.

11. Mayer U., Gutmann V., Gerger W. The acceptor number. A quantitative empirical parameter for the electrophilic properties of solvents., Chemical Monthly., 1975, Vol. 106, pp. 1235-1257.

<http://dx.doi.org/10.1007/BF00913599>

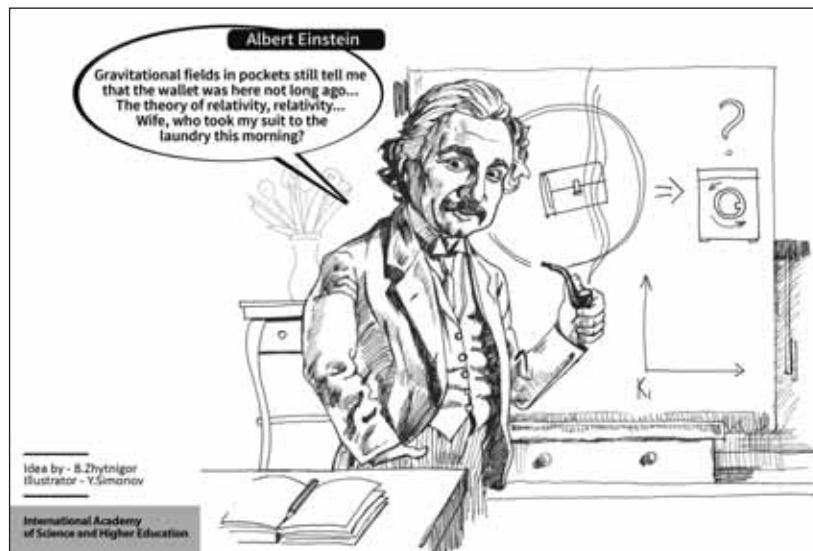
12. Mayer U., Gutmann V. Phenomenological approach to cation - solvent interactions., Structure and Bonding, 1972, Vol. 12, pp. 113-140. <http://dx.doi.org/10.1007/BFb0117542>

13. Marcus Y. Ionic radii in aqueous solution., Journal of Solution Chemistry., 1983, Vol. 12, No. 4, pp. 132-135. <http://dx.doi.org/10.1007/BF00646201>

14. Simonian G.S., Beylerian N.M. The solvent action on Michaelis reaction rate., Oxidation Communication, 2003, Vol. 26, No. 4, pp. 485-491.

Information about author:

1. Geworg Simonian - Candidate of Chemistry, Associate Professor, Yerevan State University; address: Armenia, Yerevan city; e-mail: sim-gev@mail.ru



CRITERIA OF REACTIVITY OF α, β -UNSATURATED COMPOUNDS

G. Simonian, Candidate of chemical sciences, Dean
Yerevan State University, Armenia

The author considers the parameters characterizing the reactivity of unsaturated compounds in the non-radical and radical reactions and often used in the correlation analysis. It is shown that Alfrey's and Price's parameters Q and e correlate with Taft's substituent constant σ^0 , with parameters of Benford β and Friedman P_v , with a dipole moment of unsaturated compounds and charge of β -carbon in the unsaturated compound molecule.

Keywords: parameters of monomers, unsaturated compound, correlation, the Michael reaction, Alfrey's and Price's parameters.

Conference participants, National championship in scientific analytics,
Open European and Asian research analytics championship


КРИТЕРИИ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ α, β -НЕНАСЫЩЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Симонян Г.С., канд. хим. наук, доцент
Ереванский государственный университет, Армения

Обсуждаются параметры, которые характеризуют реакционную способность ненасыщенных соединений в нерадикальных и радикальных реакциях и часто применяются в корреляционном анализе. Показано, что параметры Q и e Альфрея и Прайса коррелируются с константой заместителя Тафта σ^0 , с параметрами Бенфорда β и Фридмана P_v , с дипольным моментом ненасыщенных соединений и зарядом β -углерода в молекуле ненасыщенного соединения.

Ключевые слова: параметры мономеров, ненасыщенные соединения, корреляция, реакция Михаэля, параметры Альфрея и Прайса.

Участники конференции, Национального первенства по научной аналитике,
Открытого Европейско-Азиатского первенства по научной аналитике

 <http://dx.doi.org/10.18007/gisap:pmc.v0i5.1042>

Изучение связи между реакционной способностью соединений с их строением (с природой входящих в них групп) является предметом исследования физической органической химии. В литературе известно много параметров, которые характеризуют ненасыщенные соединения (НС), в частности, виниловые мономеры [1-6]. Эффекты, связанные с различной полярностью заместителя X в олефиновом компоненте $CH_2=C(R)X$ (где $X=CN, COOR, CONH_2$), и влияние алкильной группы качественно оценены в работе [7]. Замещение α или β -атомов водорода в молекуле α, β -НС на алкильную группу приводит к понижению активности двойной связи в реакциях присоединения. Установлено, что α -замещение делает пассивнее двойную связь, чем введение заместителя к β -атому углерода. Молекулы НС, содержащие гетероатомы (галогены, азот, кислород, сера и т.д.), которые более электроотрицательны, чем

атомы водорода, существует индуктивный эффект, т.е., смещение заряда s -связей в сторону гетероатома. Гетероатомы имеют также замкнутые электронные пары p -электронов, которые могут при известных условиях принимать участие в образовании химических связей наряду с p -электронами кратных связей (мезомерный эффект). Если гетероатомные заместители содержат кратные связи ($C=O, C \equiv N$), то необходимо учитывать также влияние сопряжения [8,9]. Все эти факторы проявляются одновременно и, строго говоря, не могут быть отделены один от другого. Реакционная способность НС возрастает при увеличении сопряжения двойной связи с заместителем.

Целью данной работы является представить и обсудить те параметры НС, которые характеризуют реакционную способность НС в нерадикальных и радикальных реакциях и часто применяются в корреляционном анализе.

Для характеристики реакцион-

ной способности НС в молекулярных (ионных) и радикальных реакциях используют различные эмпирические параметры и константы [1-9]. В таблице 3 приведены некоторые параметры акрилонитрила (АН), метакрилата (МА), метилметакрилата (ММА), акриламида (АА), Метилакриламида (ММА), винилацетата (ВА) и стирола (Ст).

Так как концентрация НС в реакциях Михаэля [13] и, в особенности, в реакциях полимеризации [8-10] соизмерима с концентрацией растворителя, то надо учитывать сольватирующие способности НС. Известно, что НС может сольватировать реагенты полимеризационной системы, КПЗ и радикалы.

В качестве меры нуклеофильной сольватационной способности НС выбран параметр основности Коппела-Пальма В [1]. Для построения шкалы нуклеофильной способности растворителей ими использованы дан-

Табл. 1.

Параметры НС

НС	АН	МА	ММА	АА	ММА	ВА	Ст
$e[2]$	1.2	0.6	0.4	1.3	1.24	-0.22	-0.8
$Q[2]$	0.6	0.42	0.74	1.18	1.46	0.026	1
e/Q	2	1.43	0.54	1.1	0.85	-7.86	-0.8
q_{bc}	0.08	0.107	0.095	0.052	0.039	-0.25	0.051
$q_{c=0}$	-0.059	-0.378	-0.379	-0.392	-0.393	-0.118	-
$s^0[10]$	0.63	0.36	0.26	0.27	0.20	-	0.04
$m[11]$	3.8	1.67	1.67	-	-	1.75	0.56
$h[12]$	0.428	-	0.565	-	-	0.46	0.73
$B[10]$	89	-	89	-	-	73	54
$b[3]$	5.3	5.2	4.9	-	-	3.0	4.85
$P_v[4]$	0	0.6	-	-1	-	-	-

ные по ИК-спектрам дейтерометанола CH_3OD

$$B = \nu_0\text{OD} - \nu\text{OD},$$

где $\nu_0\text{OD}$ и νOD – частоты валентных колебаний связи OD в CH_3OD , газовой фазе и данном растворителе, в частности в НС.

В ряду $\text{АН} > \text{МАА} > \text{ВА} > \text{СТ}$ В уменьшается.

Известно, что в жидкофазных радикальных реакциях вязкость среды влияет на эффект “клетки”. Полярность НС характеризует также дипольный момент. Как видно из таблицы, по дипольным моментам НС располагаются в ряд



В литературе известны также другие параметры, характеризующие активность НС, полученные с использованием различных реакционных серий. Так, параметр Фридмана [4]: $P_v = \lg k_x/k_{\text{АН}}$

где k_x и $k_{\text{АН}}$ – константы скоростей реакций глицина с НС и АН в воде. Для АН, МА, АА и винилметилсульфоната получены следующие значения P_v 0, 0,6, –1 и 0,8.

Для характеристики НС в радикальных процессах Бемфорд и Дженкинс [3] предложили следующее эмпирическое уравнение для константы скорости радикальной реакции:

$$\lg k = \lg k_t + a\sigma + b$$

В этом уравнении k_t – константа скорости передачи цепи через толуол. Параметр σ характеризует полярные свойства заместителей в полимерном радикале. Параметр σ в простейших случаях приравнивается константе s^0 Гаммета для p -заместителя. Параметры a и b характеризуют свойства НС. Значения a лежат в пределах от –5 до 1.

Впервые Альфрейом и Прайсом [2] предложено эмпирическое уравнение для выражения реакционной способности (сравнительных активностей) виниловых мономеров при их радикальной сополимеризации (r_1 и r_2):

$$k_{12} = P_1 Q_2 \exp(-e_1 e_2)$$

где k_{12} – это константа элементарной реакции соединения радикала M_1

с мономером M_2 . Откуда получается, что:

$$r_1 = k_{11}/k_{12} = Q_1/Q_2 \exp[-e_1(e_1 - e_2)]$$

$$r_2 = k_{22}/k_{21} = Q_2/Q_1 \exp[-e_2(e_2 - e_1)]$$

Принято Q и e называть параметрами Альфрея и Прайса. Они вычисляются из опытных данных с учетом r_1 и r_2 и, условно принимая для стирола, $Q = 1$ и $e = -0,8$.

Параметр Q включает в себя резонансные и стерические эффекты, параметр e связан с полярностью мономера [2]. Теоретическое рассмотрение значений Q и e показывает, что чем больше Q и меньше e , тем активнее мономер по отношению к радикалам. Получается, что соотношение e/Q удовлетворительно коррелируется с константой заместителя Тафта s^0 [5,6] и μ (без ВА), а с P_v плохо.

$$s^0 = (0,135 \pm 0,05) + (0,187 \pm 0,04) e/Q,$$

$$r = 0,908, s = 0,920, n = 5$$

$$\mu = (1,155 \pm 0,502) + (0,972 \pm 0,380) e/Q,$$

$$r = 0,875, s = 0,803, n = 4$$

$$P_v = (-1,452 \pm 0,87) + (2,404 \pm 1,55) e/Q,$$

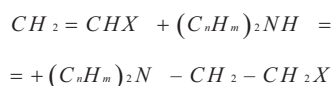
$$r = 0,492, s = 0,995, n = 3$$

Следует отметить, что получается отличная корреляция между β и e/Q .

$$\beta = (4,87 \pm 0,05) + (0,24 \pm 0,01) e/Q,$$

$$r = 0,994, s = 0,499, n = 5$$

Впервые нами использованы параметры Q и e Альфрея и Прайса [14] для выражения активности α, β -ненасыщенных соединений при их нерадикальных реакциях с аминами.



Ввиду того, что реакции Михаэля протекают по нерадикальному механизму, естественно полагать, что чем меньше Q и больше e , тем активнее мономер по отношению ко вторичным аминам, в отличие от радикальных реакций, например, радикальной сополимеризации.

Показано, что для водорастворимых мономеров (АН, АА, МАА), также как для маслорастворимых АН, МА, МАА в ДМФ с увеличением значения отношения e/Q скорость

реакции $\text{НС} +$ вторичный амин закономерно увеличивается. Например, получается хорошая корреляция между константой скорости реакции АН, МА, МАА с пиперидином в ДМФ и отношением e/Q .

$$\lg k = -3,32455 + 0,10966 e/Q, r = 1,$$

Анализ реакционной способности НС со вторичными аминами показал, что для мономеров, когда $e/Q > 0$ (например АН, МА, МАА, АА, МАА и т.д.), реакция идет без катализатора, а если $e/Q < 0$ (например СТ), реакция протекает только в присутствии катализатора; когда $e/Q < 0$ (для ВА $e/Q = -7,86$) механизм реакции со вторичными аминами коренным образом отличается от механизма реакции Михаэля. Для ВА реакционным центром является не β -С, а карбонильная группа.

Так как константы σ , e , и в какой-то мере Q отражают сравнительную величину электронной плотности на реакционном центре, т.е. показывают, как заместитель изменяет (уменьшает или увеличивает) электронную плотность на реакционном центре, можно было ожидать линейную связь между ними и зарядами атомов в молекулах НС.

Как вытекает из механизма взаимодействия НС + вторичный амин, активность мономера зависит от суммарных зарядов β -углерода ($q_{\beta\text{C}}$) и кислорода карбонильной группы ($q_{\text{C=O}}$) в молекуле мономера (чем больше $q_{\beta\text{C}}$, тем активнее мономер). Значения квантовохимических расчетов $q_{\beta\text{C}}$ и $q_{\text{C=O}}$ НС приведены в таблице. Нами в работе [14], используя также значения $q_{\beta\text{C}}$, Q и e и N -винилпроизводных дифениламина, фенотиазина, пиррола, индола и карбазола, приведенных в работе [15], получена хорошая корреляция между $q_{\beta\text{C}}$ и соотношением e/Q .

$$q_{\beta\text{C}} = (0,0130 \pm 0,0093) +$$

$$+ (0,0369 \pm 0,0033) e/Q, r = 0,96821, p = 10$$


Таким образом, согласно нашим расчетам, параметры Альфрея и Прайса Q и e , которые отражают сравнительную величину электронной плотности атомов в молекуле НС вообще и, в частности, у β -углеродного атома, хорошо коррелируются с остальными параметрами НС и могут быть критериями реакционной способности НС в их нерадикальных и радикальных реакциях.

Так как в реакции Михаэля можно рассматривать диполь-дипольным или ион-дипольным взаимодействием, и она начинается по схеме 1,4-присоединения, то для характеристики активности мономера помимо заряда β -углеродного атома важен и заряд $q_{C=O}$. Нами предлагается корреляционное уравнение, связывающее логарифму констант скорости реакции HC – амин с зарядом β -углеродного атома и зарядом заместителя в 4 месте (C^N и $C=O$), в молекуле HC в виде: $lgk=a_0+a_1q_{bc}+a_2q_{C=O}$.

References:

1. Pal'm V.A. Osnovy kolichestvennoi teorii organicheskikh reaktsii [Fundamentals of the quantitative theory of organic reactions] – Leningrad., Khimiya [Chemistry], 1977. – 360 p.


2. Alfrey T., Price C. Relatives reactivities in vinyl copolymerization, Journal of Polymer Science. – 1947., No. 2., pp. 101-106.

 <http://dx.doi.org/10.1002/pol.1947.120020112>


3. Bamford C., Jenkins J.S. Pattens on free radical reactiviti. III. Transactions of the Faraday Society., 1963., Vol. 59., pp. 530-539

 <http://dx.doi.org/10.1039/TF9595500418>

4. Fridman M., Wall J. Additive Linear Free-Energy Relationships in Reactions Kinetics of Amino Groups with a,b-Unsaturated Compounds. The Journal of Organic Chemistry. – 1966., Vol. 31, No. 9., pp. 2880-2885.

 <http://dx.doi.org/10.1021/jo01347a036>

5. Taft R.W. Polar and Staric Substituent Constants for Aliphatic and o-Benzoate Groups from Rates of Esterification and Hydrolysis of Esters. Journal of the American Chemical Society. – 1952., Vol. 74., No.12., pp. 3120-3128.

 <http://dx.doi.org/10.1021/ja01132a049>

6. Taft R.W. The General Nature of the Proportionality of Polar Effects of Substituent Groups in Organic Chemistry. Journal of the American Chemical Society. – 1953., Vol. 75., No. 17, pp. 4231-4238.

 <http://dx.doi.org/10.1021/ja01113a027>

7. Kost A.N., Suminov S.I. O vliyaniy rastvoritelei i prostranstvennykh

faktorov v reaktsii Mikhaelya [On the the influence of solvents and spatial factors in the Michael reaction], ZhOKh, 1965., Issue 8, Vol. 1., pp. 1341-1344.

8. Bagdasaryan Kh.S. Teoriya radikal'noi polimerizatsii [Radical polymerization theory]. –Moscow., Nauka [Science], 1966. – 298 p.

9. Oudian Dzh. Osnovy khimii polimerov [Fundamentals of polymer chemistry] –Moscow., Mir, 1974. – 614 p.

10. Entelis S.G., Tiger R.P. Kinetika reaktsii v zhidkoi faze [The kinetics of reactions in the liquid phase] – Moscow., Khimiya [Chemistry], 1973. – 416 p.

11. Osipov O.L., Minkin V.M. Spravochnik po dipol'nyy momentam molekul [Guide to the molecular dipole moment of molecules] – Moscow., Vyssh. Shkola [High school], 1965. – 219p.

12. Monomeri [Monomers] ed. By V.V. Korshaka – Moscow., I.L. – 1951.

13. Khimiya alkenov [Chemistry of alkenes], ed. by S. Pataya. – Leningrad., Khimiya[Chemistry], 1969. – 260 p.

14. Simonyan G.S., Beileryan N.M. Parametry Al'freya-Praisya kak kriterii reaktsionnoi sposobnosti α,β -NS v reaktsii so vtorichnymi aminami [Alfrey and Price parameters as criteria of reactivity of α,β -NA in the reaction with secondary amines], Khimich. zhurn. Armenii [Chemical journal of Armenia]. – 2001., Vol. 54., No. 3-4, pp. 130-132.

15. Gaintseva L.L., Kurov G.N. Vliyanie stroeniya N-vinil'nykh monomerov na ikh aktivnost' v sopolimerizatsii s N-vinilfenotiazinom [Influence of the structure of N-vinyl monomers on their activity in the co-polymerization with N-vinyl phenothiazine], Thesis report. "Radikal'naya polimerizatsiya" [«Radical Polymerization»] – Gorkii., 1989., pp. 25-26.

Литература

1. Пальм В.А. Основы количественной теории органических реакций. – Л.,Химия,– 1977. –360с.

2. Alfrey T., Price C. Relatives reactivities in vinyl copolymerization // J. Polymer Sci.–1947. - № 2. - P.101-106.

3. Bamford C.,Jenkins J.S. Pattens on free radical reactiviti. III.//Trans. Farad.Soc. 1963.–V.59.– P.530-539

4. Fridman M., Wall J. Additive Linear Free-Energy Relationships in Reactions Kinetics of Amino Groups with a,b-Unsaturated Compounds. //J. Org.Chem.,–1966.–V.31,–№9,–P.2880-2885.

5. Taft R.W. Polar and Staric Substituent Constants for Aliphatic and o-Benzoate Groups from Rates of Esterification and Hydrolysis of Esters.//J. Am. Chem. Soc., – 1952. – V.74,– №12,– P. 3120-3128.

6. Taft R.W. The General Nature of the Proportionality of Polar Effects of Substituent Groups in Organic Chemistry.// J. Am. Chem. Soc.,–1953. –V.75,–№17,–P. 4231-4238.

7. Кост А.Н., Суминов С.И. О влиянии растворителей и пространственных факторов в реакции Михаэля.// ЖОХ,–1965.– Вып.8, – Т.1, – С.1341-1344.

8. Багдасарян Х.С. Теория радикальной полимеризации.–М.,Наука, –1966. –298 с.

9. Оудиан Дж. Основы химии полимеров. – М., Мир, – 1974.– 614 с.

10. Энтелис С.Г., Тигер Р.П. Кинетика реакций в жидкой фазе. –М., Химия, –1973.– 416 с.

11. Осипов О.Л., Минкин В.М. Справочник по дипольным моментам молекул. – М., Высш. школа, – 1965. – 219с.

12. Мономери/под.ред.Коршака В.В. – М.,И.Л. – 1951.

13. Химия алкенов. /под ред. С.Патая/. –Л., Химия, – 1969. – 260 с.

14. Симонян Г.С., Бейлерян Н.М. Параметры Альфрея-Прайса как критерии реакционной способности α,β -НС в реакции со вторичными аминами. //Химич.журн.Армении,–2001.– Т.54,–№3-4,–С.130-132.

15. Гайнцева Л.Л., Куров Г.Н. Влияние строения N-винильных мономеров на их активность в сополимеризации с N-винилфенотиазином.// Тез. Докл. "Радикальная полимеризация" .– Горкий,–1989.–С.25-26.

Information about author:

1. Geworg Simonian - Candidate of Chemistry, Associate Professor, Yerevan State University; address: Armenia, Yerevan city; e-mail: sim-gev@mail.ru

GISAP Championships and Conferences 2015

Branch of science	Dates	Stage	Event name
APRIL			
Economics, Law and Management / Sociology, Political and Military Sciences	21-27.04	I	The dominant of the humanism principle in modern social concepts and the civilized practice of public relations
Physics, Mathematics and Chemistry / Earth and Space Sciences	21-27.04	I	Studying the nature of matter and physical fields in the search for ways of the fundamental scientific gnoseology problems solution
JUNE			
Technical Sciences, Construction and Architecture	18-24.06	I	Technical progress of mankind in the context of continuous extension of the society's material needs
Education and Psychology	04-09.06	II	Functions of upbringing and education in conditions of the accelerated socialization of the personality in the modern society
JULY			
Philological Sciences	15-22.07	II	Development of the spoken and written language at the current stage of the intensive information turnover
Culturology, Sports and Art History / History and Philosophy	21-27.07	II	The event-based structure, as well as cognitive, moral and aesthetic contents of the historical process
Medicine, Pharmaceutics / Biology, Veterinary Medicine and Agriculture	21-27.07	II	Life and health of the person through the prism of the development of medicine, food safety policy and preservation of the biodiversity
AUGUST			
Economics, Law and Management / Sociology, Political and Military Sciences	05-11.08	II	Modern trends in the intensive development of public relations and actual methods of their effective regulation
Physics, Mathematics and Chemistry / Earth and Space Sciences	05-11.08	II	Material objects and their interactions in the focus of modern theoretical concepts and experimental data
Technical Sciences, Construction and Architecture	26-31.08	II	Peculiarities of development of public production means and material recourses ensuring the activity of the person in early XXI century
SEPTEMBER			
Education and Psychology	15-22.09	III	Pressing problems of interpersonal communications in the educational process and the social practice
OCTOBER			
Philological Sciences	08-13.10	III	The role of linguistics and verbal communications in the process of informational support of ethnic originality of nations and their progressive interaction
Culturology, Sports and Art History / History and Philosophy	21-27.10	III	Factor of ideology and the driving force of human aspirations in the process of historical formation of moral and aesthetic culture
NOVEMBER			
Medicine, Pharmaceutics / Biology, Veterinary Medicine and Agriculture	04-09.11	III	Modern features of development of Biological science as factors of solution of pressing problems of human survival and the natural environment
Economics, Law and Management / Sociology, Political and Military Sciences	19-25.11	III	Conditions and aims of development of public processes in the context of priority of liberal values and respect to moral and cultural traditions
DECEMBER			
Physics, Mathematics and Chemistry / Earth and Space Sciences	03-08.12	III	Innovative approaches to the solution of systemic problems of fundamental sciences and matters of practical implementation of innovations
Technical Sciences, Construction and Architecture	16-21.12	III	Combination of factors of productivity, efficiency and aesthetics in modern requirements to functions and quality of technical devices and construction projects



International Academy of Science and Higher Education (IASHE)
1 Kings Avenue, Winchmore Hill, London, N21 3NA, United Kingdom
Phone: +442071939499
E-mail: office@gisap.eu
Web: <http://gisap.eu>